

**Simetrías, Ondas
y
Principios
Fundamentales**

**Apuntes
de Física
Cuántica**

Alejandro Valderrama

APUNTES DE FÍSICA CUÁNTICA

SIMETRÍAS, ONDAS Y PRINCIPIOS FUNDAMENTALES

Autor: A. Valderrama 

© 2025 A. Valderrama. Todos los derechos reservados.

DESCARGO DE RESPONSABILIDAD



- Los temas desarrollados han sido elaborados de manera original por el Autor para la impartición de algunos cursos en la Facultad de Ciencias, UNAM.
- La información presentada ha sido tomada de múltiples fuentes, algunas referidas en la bibliografía del curso y otras de información disponible en la Internet de *dominio público*.
- Algunos párrafos pueden ser tomados textuales o traducidos, o algunas fotos reproducidas de manera directa o indirecta, en todos los casos se ha realizado un trabajo de recopilación, organización y edición original.
- En ningún momento el realizador pretende adjudicarse la autoría de ninguna de todas las partes componentes de este material didáctico; más, sin embargo, sí la autoría y propiedad de la composición como material didáctico terminado o en desarrollo.

Declaración Americana de los Derechos y Deberes del Hombre.

Artículo 4°. Derecho de libertad investigación, opinión, expresión y difusión.

- “Toda persona tiene derecho a la libertad de investigación, de opinión y de expresión y difusión del pensamiento por cualquier medio”

Se permite la reproducción total o parcial de esta obra por cualquier medio sin que se requiera la autorización expresa del autor. Agradezco cualquier cita o referencia que mencione esta fuente o el trabajo del Autor.

POLIGONO
EDICIONES

Para contacto o correspondencia académica:

✉ [alecvald@ciencias.unam.mx]

ISBN: 9798244213072

Prólogo del Autor

El propósito de estos *Apuntes de Física Cuántica* es llevar un registro *complementario*, lo más detallado posible, más no exhaustivo, de algunos de los temas destacados estudiados en clase, así como presentar un poco de material adicional (*recopilado*) para aquellos que deseen profundizar un poco más en algunos de los temas expuestos.

Estos *Apuntes* pueden ser utilizadas por los estudiantes o profesores como material de consulta y hasta como una guía de estudio, comprendiendo que en ningún momento podrán sustituir la asistencia a clase, ni el estudio, de los diferentes temas impartidos, en los libros correspondientes a esta materia o que puedan estar relacionados y presenten la teoría “completa”.

Algunas de las clases quedan reseñadas, pero en muchos casos solo se mencionan los temas estudiados y deberá consultarse alguna bibliografía adicional. Los diferentes temas son tratados de manera independiente, de modo que no es necesario una lectura continuada, basta leer los temas que resulten de mayor interés.

Adicionalmente, es necesario aclarar que tener o estudiar estos *Apuntes* no es indispensable, ni tampoco un requerimiento para llevar o impartir el curso correctamente. Son un material de uso enteramente opcional que puede servir de apoyo a los que así lo deseen.

AV.



Formuló el **principio de incertidumbre**, uno de los pilares de la mecánica cuántica, que establece que es imposible conocer con precisión simultáneamente la posición y la velocidad de una partícula subatómica.

Tabla de Contenido

<i>Prólogo del Autor</i>	3
1. Simetrías fundamentales	6
<i>1.1 Principio de mínima acción</i>	7
<i>1.2 Mediciones</i>	7
<i>1.3 Postulados de estabilidad de la Física Moderna</i>	8
2. Relatividad Especial	9
<i>2.1 Postulados</i>	9
<i>2.2 Experimento de Michelson-Morley</i>	10
<i>2.3 Consecuencias de los postulados</i>	11
3. El Movimiento Ondulatorio	12
<i>3.1 Ondas unidimensionales</i>	13
<i>3.2 La ecuación diferencial de onda</i>	14
<i>3.3 Ondas armónicas</i>	15
<i>3.4 Fase y velocidad de fase</i>	16
<i>3.5 El principio de superposición</i>	17
<i>3.6 Notación compleja</i>	17
<i>3.7 Ondas planas (3D)</i>	18
4. Ondas Electromagnéticas	20
<i>4.1 Medios no conductores</i>	20
<i>4.2 Polarización</i>	24
<i>4.3 Ondas planas en un medio conductor</i>	27
<i>4.4 Potenciales y campos retardados</i>	31
<i>4.5 Radiación de una carga acelerada</i>	36
5. Ondas y partículas	37
<i>5.1 Cuanto de luz y relaciones de Planck-Einstein</i>	37
<i>5.2 Dualidad onda-partícula</i>	38
<i>5.3 El principio de la descomposición espectral</i>	41

6. Formalismo de la mecánica cuántica	43
6.1 Espacio de funciones de onda de una partícula.	43
ESTRUCTURA DEL ESPACIO F DE FUNCIONES DE ONDA	43
EL PRODUCTO ESCALAR	44
OPERADORES LINEALES	44
BASES ORTONORMALES DISCRETAS EN F	46
6.2 Espacio de estados. Notación de Dirac	49
VECTORES “KET” Y “BRA”	49
OPERADORES LINEALES	52
CONJUGACIÓN HERMITIANA	54
CORRESPONDENCIA ENTRE UN OPERADOR Y SU ADJUNTO	57
OPERADORES HERMITIANOS	59
6.3 Representación en el espacio de estados	60
RELACIONES DE LAS BASES ORTONORMALES	60
REPRESENTACIÓN DE BRAS:	64
REPRESENTACIÓN DE OPERADORES	65
6.4 Ecuaciones de valores propios y observables	69
VALORES Y VECTORES PROPIOS DE UN OPERADOR	69
CONJUNTOS DE OBSERVABLES QUE CONMUTAN	75
6.5 Representaciones y observables	79
LAS REPRESENTACIONES $\{ r\rangle\}$ y $\{ p\rangle\}$	79
LOS OPERADORES R Y P	83
6.6 Producto tensorial de espacios de estados	87
DEFINICIÓN Y PROPIEDADES DEL PRODUCTO TENSORIAL	87
ESTADOS DE PARTÍCULAS EN UNA Y TRES DIMENSIONES	91
CONJUNTOS DE OPERADORES QUE CONMUTAN EN E	93
7. Postulados de la mecánica cuántica	94
7.1 Variables dinámicas fundamentales	94
7.2 Degeneración de los niveles de energía	98

1. Simetrías fundamentales

La física trata del estudio de las simetrías en los sistemas naturales. Se puede entender por simetría a alguna correspondencia exacta entre las partes de un sistema o a la propiedad de un sistema tal que al aplicarse una transformación esta propiedad se mantenga sin cambios; es decir, invariante.

Ejemplo: las posiciones de los vértices $\{A, B, C\}$ de un triángulo equilátero en posición normal quedarán invariantes ante una *rotación de 120°* con eje de giro en el centro del triángulo.

De modo que: $\text{Rot}(120^\circ)\{A, B, C\} = \{A, B, C\}.$

Entonces podemos decir que este sistema posee una simetría con respecto al operador o transformación $\text{Rot}(120^\circ)$, las invariantes o constantes correspondientes serán las coordenadas de los vértices.

TEOREMA: *A toda simetría le corresponde una cantidad constante.*

En el caso de la mecánica clásica las simetrías de un sistema corresponden a las llamadas **constantes de movimiento** que son magnitudes físicas (como *energía*, *momento lineal* o *angular*) que permanecen invariantes a lo largo de la trayectoria de un sistema mecánico. Encontrar dichas constantes de movimiento es conocer las características esenciales del sistema y por tanto su comportamiento, ya que estas cantidades restringen la evolución del sistema en particular.

Ejemplo: Un sistema *estacionario* es invariante en el tiempo: $\hat{T} s(t) = s(t')$.

Lo cual constituye una simetría y por ello existe una cantidad constante o que se conserva, la variable conjugada, que en este caso es la energía.

$$\Rightarrow E \cdot t = [(g \text{ cm}^2 / \text{s}^2) \text{ s}] = [\text{J s}] = [\text{Acción}]$$

También, $\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} = [g \text{ cm}^2 / \text{s}]$ *tiene las mismas unidades!*

La acción en física representa el producto de la energía por el tiempo o momento por distancia, y se mide principalmente en julios-segundo $[\text{J} \cdot \text{s}]$ en el Sistema Internacional (**SI**) y constituye un *escalar*.

Nota: la *posición* no es una constante de movimiento es una variable, al igual que la *velocidad*, la *aceleración* y la *masa*.

1.1 Principio de mínima acción

Es un principio básico de la física. Si un sistema es invariante entonces hay una cantidad que se conserva, al multiplicarla por su variable conjugada se obtendrá un valor con unidades de Acción.

Así, en todo problema de la física clásica es necesario resolver: $\int_c \delta(h)$,

"La integral de la variación de la función h sobre la curva C " que permite conocer la ruta de mínima energía para que el sistema pase de una configuración a otra.

En el caso de la mecánica cuántica, este principio es modificado, aceptando la imposibilidad de que la mínima acción sea igual a cero. De modo que se tiene:

$$\int_c \delta(h) \neq 0$$

Así que: $E \cdot t \geq \hbar$; con $\hbar \equiv h / 2\pi$; $h = 6.26 \times 10^{-34} \text{ J s}$ "Cte. de Planck".

 El suponer cierto que, para el comportamiento submicroscópico se tiene un **mínimo de acción** (cuanto de acción de Planck) diferente de cero permite explicar y predecir el comportamiento de una gran cantidad de fenómenos de naturaleza discreta, que desde el punto de vista clásico (con variables continuas) simplemente no es posible.

Este descubrimiento aunado con la proposición de que la velocidad de la luz, c , es un máximo absoluto de velocidad constituyen las bases de la Física Moderna.

1.2 Mediciones

¡Comparar es medir y nos permite dar cuenta de las cosas!

Podríamos preguntarnos acerca de si la realidad física es una. Para poder responder esta pregunta es necesario conocer diferentes aspectos de esta, a través de identificarlos y caracterizarlos ya sea por comparación o ponderación; así que, requerimos comprender mejor lo que significa *medir*.

Para medir requerimos un instrumento de medición (comparación) que podemos definir como un *operador* matemático aplicado a una propiedad cuantitativa.

Ejemplo: $\hat{T}S = S'$ que puede entenderse como una ecuación general para representar la acción de medir.

Para medir un parámetro de un sistema debe hacerse "*interaccionar*" el instrumento de medición con el sistema para obtener un número. Aquí, *interaccionar* debe entenderse como

interactuar en directo con las variables del sistema o bien, aplicarse de manera indirecta cuando ya se conocen las características y propiedades del instrumento de medición.

Supóngase que S_t denota al sistema preparado para la medición con el operador $\hat{T}$, entonces se dice que el sistema está en un **estado propio** para ser medido, de este se extraerá un **número propio** <<eigen>>.

$$\Rightarrow \hat{T} S_t = \lambda S_t$$

Donde λ es el *eigenvalor* o *valor propio* obtenido. ¡Nótese que el sistema queda igual!

Ejemplo: algunas de las medidas más asombrosas que se tienen en la actualidad son las del tamaño de las partículas atómicas:

$$1 \text{ átomo mide } \approx 1 \text{ Å} = 1 \times 10^{-10} \text{ m}$$

$$1 \text{ electrón mide } \approx 1 \text{ Fermi} = 1 \times 10^{-15} \text{ m}$$

Los sistemas que se encuentran en estas escalas presentan límites universales. Así que en el caso de los átomos no existe ninguno que sea menor que el que posee un solo protón (ya que las subpartículas que lo conforman no tienen las mismas propiedades de agregación por separado. Tampoco existen cargas eléctricas que correspondan a fracciones de la magnitud de carga del electrón; de modo que su carga se considera la unidad fundamental.

1.3 Postulados de estabilidad de la Física Moderna

- | | | |
|-------------------------------|---|-------------------|
| I. <i>Mínima Acción</i> | → | Mecánica Cuántica |
| II. <i>Constante Lumínica</i> | → | Relatividad |



El universo físico se encuentra TODO en este espacio fase.

De aquí las unidades naturales del universo sean: $c \equiv 1$ y $\hbar \equiv 1$.

2. Relatividad Especial

2.1 Postulados

En 1905 Albert Einstein publicó el artículo “*Sobre la electrodinámica del movimiento de los cuerpos*” con la Teoría de la Relatividad que establece los siguientes postulados:

I. No existe un sistema de referencia absoluto.

II. La velocidad de la luz es independiente del movimiento de la fuente.

En concordancia con el hecho de que anteriormente, en 1860 James Clerk Maxwell había publicado su teoría del electromagnetismo, la cual, con cuatro ecuaciones, comprende toda la fenomenología de la electricidad y el magnetismo. Esta teoría predice la existencia de ondas electromagnéticas que se propagan en el espacio con velocidad 3×10^8 m/s. Maxwell notó que esta velocidad era la misma que la medida para la luz, por lo que sugirió que la luz era una onda electromagnética.

En esa época resultaba imposible producir luz eléctrica en el laboratorio pues los circuitos eran macroscópicos y su frecuencia no era suficientemente alta (se requieren 5×10^{14} Hz para una onda de 6000 Å). Fue Hertz quien en 1896 logró producir ondas de muy bajas frecuencias, lo que hoy conocemos como ondas de radiofrecuencia.

De manera similar a una onda de sonido que viaja con velocidad de 332 m/s en el aire independientemente del estado de movimiento de la fuente, la luz viaja a velocidad c en el **medio electromagnético**, al cual, se le llamó **éter** y se supuso inicialmente con cualidades extraordinarias, una gran rigidez para permitir ondas de altas frecuencias y al mismo tiempo, en extremo tenue e inerte al movimiento planetario dado que las órbitas de los planetas se pueden calcular con gran exactitud usando las ecuaciones de Newton y sin considerar ningún tipo de fricción con dicho **éter**.

Sin embargo, en el caso de una onda sonora, su velocidad, sí se verá afectada por la del medio de modo que es: la suma de la velocidad de propagación de la onda en el aire más la velocidad del volumen de aire mismo (como corriente).

$$\text{Velocidad de la onda sonora} = 332 \text{ m/s} + V_{\text{aire}}.$$

Para el caso de las ondas electromagnéticas, su propagación en el espacio tiempo se lleva a cabo a velocidad c , sin que exista la posibilidad de sumarle alguna velocidad asociada al medio electromagnético.

Nota: actualmente el Espacio Tiempo cosmológico se considera en expansión mediante una cantidad conocida como **Energía Oscura**, de manera que puede interpretarse como un factor que permite las existencia de velocidades superlumínicas en esa escala cosmológica.

2.2 Experimento de Michelson-Morley

En la época en que se consideraba la posibilidad de existencia del *éter* resultaba de especial interés el determinar la velocidad de la Tierra respecto de este medio; ya que, según Maxwell la velocidad de la luz c medida en la Tierra sería afectada por la velocidad V_T de la Tierra respecto del *éter*, apareciendo el término de 2º orden V_T^2 / c^2 , el cual era demasiado pequeño como para poder detectarse.

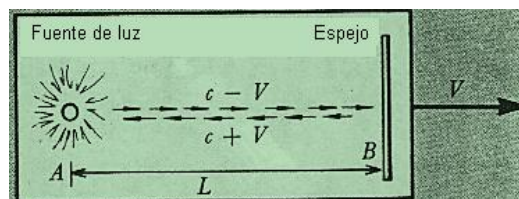
Un método usado para medir la velocidad de la luz era el del físico francés Hippolyte Fizeau, que consistía en hacer pasar un rayo de luz por los huecos de una rueda que giraba a gran velocidad. La luz viajaba hasta un espejo ubicado a varios kilómetros, rebotaba, y volvía. Si la rueda giraba lo suficientemente rápido, los dientes bloqueaban el regreso del haz. Así, Fizeau logró calcular el tiempo que tardaba la luz en ir y volver... ¡con precisión asombrosa!

Sus resultados arrojaron un valor cercano a 313,000 km/s, muy cerca del valor aceptado hoy: 299,792 km/s.

VELOCIDAD DE LA LUZ RELATIVA AL ÉTER:

Según el punto de vista clásico, el tiempo de recorrido del pulso de luz, ida y vuelta, entre los dos espejos colocados a una distancia L estaría dado por:

$$T = \frac{L}{c - V_T} + \frac{L}{c + V_T} = \frac{2L}{c} \left(1 - \frac{V_T^2}{c^2}\right)^{-1} \approx \frac{2L}{c}$$



Cálculo de la velocidad de la Luz respecto al éter.

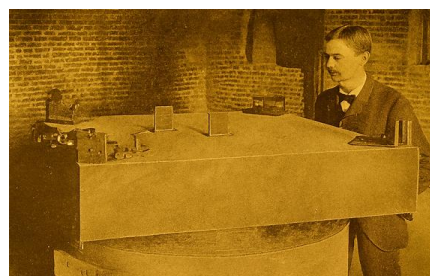
considerando el término de 2º orden V_T^2 / c^2 muy pequeño.

Donde V_T es la velocidad del sistema (fijo en la Tierra) respecto del *éter*, y se puede tomar en primera aproximación como la velocidad orbital alrededor del Sol, $V_O \approx 3 \cdot 10^4 \text{ m/s} = 10^{-4} c$. de modo que ¡el término $V_T^2 / c^2 \approx 10^{-8}$ ¡ sí que es muy pequeño!

En 1881 Michelson realizó un experimento en el que usó un interferómetro para descomponer un haz de luz con longitud de onda $\lambda = 5.9 \times 10^{-7} \text{ m}$ en dos con trayectorias perpendiculares entre sí y una diferencia de camino óptico conocida.

Tomando para V_T la velocidad orbital mencionada se esperaba un corrimiento en las franjas observable de 0.4. Debido a que no pudo observar ningún corrimiento en las franjas de interferencia obtenidas en el punto de observación del interferómetro reportó que la luz no presentaba ningún movimiento relativo al *éter*.

La explicación la da el **Postulado I** de Einstein.



Michelson operando su Interferómetro.

2.3 Consecuencias de los postulados

El hecho verificado de que la velocidad de la luz sea la misma para cualquier marco de referencia inercial puede entenderse considerando que un fotón es una perturbación del *Campo Electromagnético* mismo, que comparte con el *Espacio Tiempo* el que subyace a todo movimiento.

Cuando movemos una fuente de luz, se mueve la fuente material, pero la luz que emite se desplaza en el Campo Electromagnético universal y no en el campo de velocidades relacionadas con la fuente, que carece de arrastre electromagnético. Esto conduce a modificar las ecuaciones de transformación de coordenadas de la cinemática para garantizar que las expresiones del movimiento respecto al tiempo en diferentes marcos de referencia inerciales mantengan la velocidad de la luz en su valor c .

La transformación que nos permite cambiar de marco de referencia inercial sin modificar la velocidad de la luz acopla las variables espaciales y temporales mediante el factor de Lorentz:

$$\gamma \equiv [1 - v^2/c^2]^{-1/2} \geq 1$$

De donde se obtienen los importantísimos fenómenos relativistas:

DILATACIÓN DEL TIEMPO:

$$t' \equiv [t - vx/c^2]\gamma$$

CONTRACCIÓN DE LA LONGITUD:

$$x' \equiv [x - vt]\gamma$$

Ambos fenómenos se miden al cambiar de un sistema de referencia inercial S a otro S' , en donde precisamente, la velocidad relativa v entre los marcos de referencia es el parámetro de cambio. Cuando la velocidad entre sistemas de referencia inerciales es pequeña el movimiento se describe bien con las ecuaciones clásicas, pero al aumentar la velocidad y aproximarse a c los fenómenos relativistas se vuelven relevantes.

La transformación de Lorentz establece el límite de velocidades c ; en esa situación el sistema sufre un colapso matemático, que puede entenderse como un cambio necesario de escala. Los conceptos de Espacio Tiempo y Campo Electromagnético al traspasar los límites de Planck requieren una interpretación más profunda de estos conceptos.

La Teorías Modernas de partículas y subpartículas como la Teoría de Cuerdas y de Gravitación Cuántica son una apuesta en ese sentido. El lograr un cambio de paradigma acorde al S. XXI, que permita conectar los resultados de la Relatividad y la Mecánica Cuántica pasa por dar identidad al Campo Electromagnético como una expresión del Espacio Tiempo subyacente, cuyas propiedades se manifiestan en todas las escalas, en algunas caóticamente como ocurre en la escala cuántica y en otras de manera suave como se observa que las equipotenciales continuas de los campos gravitacionales de objetos masivos como planetas, estrellas, galaxias pertenecientes a la escala cosmológica.

3. El Movimiento Ondulatorio

Para iniciar el estudio de la mecánica cuántica, es indispensable dominar la teoría de ondas, ya que esta proporciona el marco matemático necesario para describir el comportamiento de la materia a escalas subatómicas y de la radiación.

Mientras que la mecánica clásica de Newton se basa en la determinación de trayectorias precisas de partículas puntuales mediante fuerzas y aceleraciones, la mecánica cuántica establece que los objetos microscópicos no poseen una posición ni un momento definidos de manera absoluta. En su lugar, se describen mediante una función de onda, cuya evolución en el tiempo se rige por ecuaciones diferenciales similares a las que describen el sonido o las ondas en una cuerda.

Así entonces, el estudio de las ondas permite comprender cómo la energía y la información se distribuyen en el espacio sin necesidad de un soporte material rígido. Conceptos como la *frecuencia*, la *longitud de onda* y la *fase* dejan de ser simples propiedades de una perturbación mecánica para convertirse en los parámetros que definen la **energía** y la **cantidad de movimiento** de las partículas.

Además, el análisis de ondas facilita la comprensión de la cuantización; así como una cuerda tensa solo puede vibrar en ciertas frecuencias naturales o armónicos, un sistema cuántico confinado, como un electrón en un átomo, solo puede existir en estados de energía específicos.

Por lo tanto, el formalismo ondulatorio no es solo una analogía, sino la herramienta matemática fundamental para resolver la ecuación de Schrödinger que permite calcular cómo cambia en el tiempo el estado cuántico descrito por la función de onda ($\ll \textit{psi} \gg \equiv \Psi$) de partículas subatómicas (como electrones); permitiendo determinar la evolución temporal y la probabilidad de la posición y la energía de sistemas microscópicos, actuando de forma análoga a la segunda ley de Newton en la mecánica clásica. Lo cual es una manera de entender la naturaleza probabilística de la realidad.

Nota: Los parámetros *frecuencia*, *longitud de onda*, *periodo*, *fase*, etc. de las ondas son matemáticos y universales, de manera que lo mismo describen el comportamiento de una vibración en una cuerda, en una membrana o la oscilación en la superficie de agua que presente ondas como cuando cae una piedra en un estanque. También describen las características de la luz y de todas las ondas electromagnéticas y la probabilidad de estadio de un electrón en una región próxima a un núcleo atómico.

3.1 Ondas unidimensionales

“Una onda viajera clásica (macroscópica) es una perturbación autónoma en un medio, que se mueve en el espacio transportando energía e impulso”. Existen dos tipos de ondas:

LONGITUDINALES: el medio se desplaza en la dirección del movimiento de la onda.

Ejemplo: una onda en un muelle, una onda de presión en el aire (onda sonora).



TRANSVERSALES: el medio se desplaza en una dirección perpendicular a la del movimiento de la onda.

Ejemplo: las ondas en una cuerda y las electromagnéticas.



En todos los casos, si bien la perturbación que transporta energía avanza en el medio, los átomos individuales que participan en ello permanecen cerca de sus posiciones de equilibrio.

Supóngase que ψ es una perturbación que viaja en dirección positiva X con una velocidad constante v ; entonces se puede escribir: $\psi \equiv f(x, t)$.

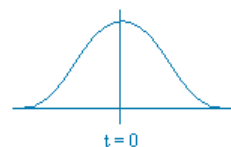
La forma de la perturbación en cualquier momento se puede conocer fácilmente.

Sea: $\psi(x, t)|_{t=0} = f(x, 0) = f(x)$, representa el perfil de la onda en el momento $t = 0$:



Ejemplo: si la función $f(x) = \text{Exp}\{-ax^2\}$; $a = \text{cte.}$

La onda tendrá la forma de una campana (función de Gauss):



Nota: resulta conveniente realizar esta gráfica en la computadora para constatar que en efecto el perfil de onda de esta función es una *Gaussiana*.

Considérese ahora una onda que no cambia su forma mientras avanza a través del espacio.

$$\Rightarrow x' = x - vt; \quad \text{así que,} \quad \psi = f(x')$$

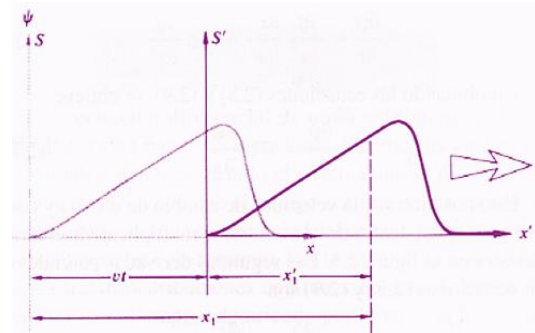
$$\Rightarrow \psi(x, t) = f(x - vt).$$

Ejemplo: para el caso particular en que:

$$f(x) = B \text{ Exp}\{-ax^2\}$$

Se tendrá: $\psi(x, t) = B \text{ Exp}\{-a(x - vt)^2\};$

Donde B es la **Amplitud** de la onda.



Pulso viajando hacia la derecha: $x' = x - vt$.

Y representa una onda que se mueve en la dirección X positiva con velocidad v.

3.2 La ecuación diferencial de onda

En una dimensión, para $x' = x \pm vt$ se puede escribir: $\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial x'} \frac{\partial x'}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial x'} \quad [3.2.1]$

ya que: $\frac{\partial x'}{\partial x} = 1$

Ahora bien, si se mantiene $x = \text{cte.}$ $\Rightarrow \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial x'} \frac{\partial x'}{\partial t} = \pm v \frac{\partial f}{\partial x'} \quad [3.2.2]$

Si pues $\psi(x') = f(x') = f(x \pm vt) = \psi(x \pm vt).$

y $\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\partial f(x \pm vt)}{\partial x} = \frac{\partial f(x')}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial x'} = \frac{\partial f}{\partial x'}.$

Comparando [3.2.1] y [3.2.2] se obtiene fácilmente que: $\frac{\partial \psi}{\partial t} = \pm v \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad [3.2.3]$

Las segundas derivadas parciales son: $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 f}{\partial x'^2}$

de [3.2.1] y $\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\pm v \frac{\partial f}{\partial x'} \right) = \pm v \frac{\partial}{\partial x'} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right);$ y como: $\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial t}$

$\Rightarrow \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \pm v \frac{\partial}{\partial x'} \frac{\partial \psi}{\partial t}$ que por [3.2.3] da: $\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x'^2}$

$\therefore \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}$ que es la **Ecuación de Onda Unidimensional**.

3.3 Ondas armónicas

Sea $\psi(x)$ una onda con perfil de función $\text{Sen}(x)$ ó $\text{Cos}(x)$, también conocidas como funciones armónicas. Toda onda puede ser descrita por una superposición de ondas armónicas.

$\Rightarrow \psi(x, t)|_{t=0} = \psi(x) = A \text{ Sen}(kx) = f(x)$; donde la constante k es el **número de onda**.

Es necesario introducir la constante k para evitar calcular el seno de una cantidad con unidades dimensionales, así que kx debe estar en radianes.

El $\text{Sen}(kx) \in [-1, 1] \Rightarrow$ el valor máximo de: $\psi(x) = A$; **Amplitud de la onda**.

El desplazamiento a velocidad v se puede escribir: $\psi(x, t) = A \text{ Sen } k(x - vt) = f(x - vt)$.

La función $\psi(x, t) = A \text{ Sen } k(x - vt)$ es solución de la ecuación diferencial de onda:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}$$

El periodo espacial se conoce como **longitud de onda** y se suele denotar por λ [m]. Este periodo tiene la característica de que: $\psi(x, t) = \psi(x \pm n\lambda, t)$; donde $\lambda = 2\pi/k$.

De modo que se tiene la siguiente definición: **$k \equiv 2\pi / \lambda$**

$\therefore \text{ Sen } k(x - vt) = \text{ Sen } k[(x \pm n\lambda - vt)] = \text{ Sen } [k(x - vt) \pm 2\pi]$; y a si: $|k\lambda| = 2\pi$

Una longitud de onda corresponde a un cambio de *fase* ϕ de 2π radianes. Así que, $\psi(x) = 0$ si $\phi = 0, \pi, 2\pi, 3\pi, \dots$ lo cual ocurre cuando $x = 0, \lambda / 2, \lambda$ y $3\lambda / 2$, respectivamente.

El **periodo temporal** τ es el tiempo en el que se repite la onda, así que: $\psi(x, t) = \psi(x, t \pm n\tau)$.

$\Rightarrow \text{ Sen } k(x - vt) = \text{ Sen } k[x - v(t \pm n\tau)] = \text{ Sen } [k(x - vt) \pm 2\pi]$.

$\therefore |k v \tau| = 2\pi$; y como todas las cantidades son positivas $\Rightarrow k v \tau = 2\pi$

$\therefore$ **$\tau = \lambda / k$**

El periodo es el mínimo de unidades de tiempo por onda cuyo inverso es la **frecuencia temporal** ν , o el número de ondas por unidad de tiempo; es decir, por segundo.

$\therefore$ **$\nu \equiv 1 / \tau$ [ciclos por segundo = Hz]**

$\therefore$ **$v \equiv \lambda \nu$ [m/s]**

Nota: este importante resultado ya era conocido por Newton en 1687.

FRECUENCIA TEMPORAL ANGULAR: $\omega \equiv 2\pi / \tau = 2\pi \nu$ [rads / s]

Con esta definición y los resultados anteriores resultan las siguientes expresiones equivalentes para describir una onda monocromática (de una sola frecuencia):

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &\equiv A \text{ Sen } k(x \pm vt) = A \text{ Sen } 2\pi \left(\frac{x}{\lambda} \pm \frac{t}{\tau} \right) = A \text{ Sen } 2\pi(kx \pm vt) \\ &= A \text{ Sen } (kx \pm \omega t) = A \text{ Sen } 2\pi \nu \left(\frac{x}{v} \pm t \right)\end{aligned}$$

Son expresiones idénticas y válidas para todo $x, t \in [-\infty, \infty]$.

3.4 Fase y velocidad de fase

Considérese una onda armónica: $\psi(x, t) \equiv A \text{ Sen } (kx - \omega t)$.

El argumento de la función seno es la **fase de la onda**: $\phi \equiv (kx - \omega t)$;

Para $\psi(x, t) = \psi(0, 0) = 0$. Lo cual es un caso especial.

En general se puede escribir: $\psi(x, t) = A \text{ Sen } (kx - \omega t + \varepsilon)$; donde ε es la fase inicial.

Tomando $\phi(x, t) = (kx - \omega t + \varepsilon) \Rightarrow \left| \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)_x \right| = \omega$

¡La rapidez del cambio de la fase es la **frecuencia angular**!

La rapidez del cambio de la fase con la distancia, con $t = \text{cte.}$, es: $\left| \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_t \right| = k$

Entonces se puede escribir: $\left(\frac{\partial x}{\partial t} \right)_\phi = \frac{-(\partial \phi / \partial t)_x}{(\partial \phi / \partial x)_t}$

Nota: que se usa mucho en termodinámica.

El término de la izquierda representa la velocidad de propagación de la condición de fase constante.

Así pues, se tiene que: $\left(\frac{\partial x}{\partial t} \right)_\phi = \pm \frac{\omega}{k} = \pm v$

Que es la velocidad a la que se mueve el perfil de la onda y se conoce como **velocidad de fase** de la onda.

3.5 El principio de superposición

Supóngase que ψ_1 y ψ_2 son dos soluciones de la ecuación diferencial de onda, entonces $(\psi_1 + \psi_2)$ también son soluciones de la misma ecuación.

$$\Rightarrow \quad \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial t^2} \quad \text{y} \quad \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial t^2}$$

Sumando ambos resultados:

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial t^2} + \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial t^2}$$

$$\therefore \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\psi_1 + \psi_2) = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} (\psi_1 + \psi_2)$$

INTERFERENCIA:

La superposición de dos ondas sinusoidales de una misma longitud es una onda con la misma λ y de amplitud igual a la suma algebraica de ambas, y depende del ángulo de fase entre ellas. Estando en fase se refuerzan, desfasadas (180°) se anulan.

Nota: el fenómeno de interferencia se estudiará con detalle más adelante.

3.6 Notación compleja

Utilizando notación compleja, la onda armónica: $\psi(x, t) = A \cos(\omega t - kx + \varepsilon)$

Se puede escribir como: $\psi(x, t) = \text{Re}[A \text{Exp}\{i(\omega t - kx + \varepsilon)\}]$

Entonces, de aquí en adelante se podrá escribir una función de onda como:

$$\psi(x, t) \equiv A \text{Exp}\{i(\omega t - kx + \varepsilon)\} = A e^{i\phi} \quad \text{¡La onda real es la parte real!}$$

Nota: conviene revisar las propiedades de los números complejos y de la fórmula de Euler.

3.7 Ondas planas (3D)

Se generan cuando las superficies sobre las cuales una perturbación es constante forman un conjunto de planos paralelos, por lo general, perpendiculares a la dirección en que se propaga la perturbación (*ondas mecánicas en agua, acústicas en sólidos o luz a través de lentes*).

Si **P** es el plano perpendicular al vector $\vec{k}$ que pasa por el punto (x_0, y_0, z_0) ,

entonces se puede escribir: $\vec{r} \equiv (x, y, z)$

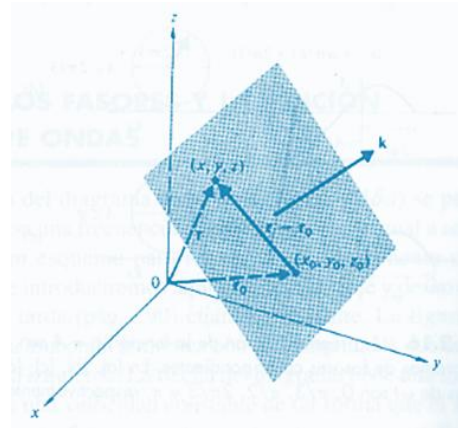
$$\text{y } \vec{r} - \vec{r}_0 = (x - x_0, y - y_0, z - z_0).$$

Y como: $(\vec{r} - \vec{r}_0) \cdot \vec{k} = 0$; con $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$

$$\Rightarrow k_x(x - x_0) + k_y(y - y_0) + k_z(z - z_0) = 0$$

Def.: $a \equiv k_x x_0 + k_y y_0 + k_z z_0 = \text{cte.}$

$\therefore \vec{k} \cdot \vec{r} = a = \text{cte.}$ es la expresión del plano **P**.



Plano **P** perpendicular al vector $\vec{k}$.

Ahora bien, se pueden construir los siguientes conjuntos de planos:

$$\psi(\vec{r}) = A \text{ Sen}(\vec{k} \cdot \vec{r}), \quad \psi(\vec{r}) = A \text{ Cos}(\vec{k} \cdot \vec{r}), \quad \psi(\vec{r}) = A \text{ Exp}\{i(\vec{k} \cdot \vec{r})\}$$

Con $\vec{k} \cdot \vec{r} = \text{cte.}$, y desplazamiento en la dirección de $\vec{k}$.

Se supone que los planos son infinitos y también que hay una infinidad de ellos.

La condición periódica es entonces: $\psi(\vec{r}) = \psi\left(\vec{r} + \frac{\lambda \vec{k}}{k}\right)$; donde $k = \|\vec{k}\|$.

En notación exponencial: $Ae^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = Ae^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} + \lambda \vec{k}/k)} = Ae^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{i\lambda k}$

Lo cual es cierto si $\text{Exp}\{i\lambda k\} = 1 = \text{Exp}\{i2\pi\}$.

$$\Rightarrow \lambda k = 2\pi \quad \text{y} \quad \vec{k} \equiv 2\pi / \lambda \quad \text{Número de onda o de propagación.}$$

Considerando el tiempo se puede escribir: $\psi(\vec{r}, t) = A \text{ Exp}\{i(\vec{k} \cdot \vec{r} \pm \omega t)\}$.

Las superficies que unen todos los puntos con igual fase se conocen como *frentes de onda*.

Nota: en ocasiones A no es constante en todo el frente de onda y es función de $\vec{r}$.

La velocidad de fase de una onda plana es equivalente a la velocidad de propagación del frente de onda.

Cuando una onda plana se propaga en dirección $\bar{\mathbf{k}}$, la componente escalar de $\bar{\mathbf{r}}$ en la dirección de $\bar{\mathbf{k}}$ es r_k .

La perturbación en un frente de onda es constante si en dt recorre dr_k a lo largo de $\bar{\mathbf{k}}$:

$$\Rightarrow \psi(\bar{\mathbf{r}}, t) = \psi(r_k + dr_k, t + dt) = \psi(r_k, t).$$

que en la forma exponencial sería: $A \text{Exp}\{i(\bar{\mathbf{k}} \cdot \bar{\mathbf{r}} \pm \omega t)\} = A \text{Exp}\{i(kr_k + kdr_k \pm \omega t \pm \omega dt)\}$

$$\Rightarrow kdr_k = \pm \omega dt$$

Y la magnitud de la velocidad de la onda es: $dr_k / dt = \pm \omega / k = \pm v$.

Se podría haber anticipado el resultado anterior, girando el sistema coordenado para que $\bar{\mathbf{k}}$ fuera paralelo al eje X.

Para esa orientación: $\psi(\bar{\mathbf{r}}, t) = A \text{Exp}\{i(kx \pm \omega t)\}$, ya que: $\bar{\mathbf{k}} \cdot \bar{\mathbf{r}} = kr_k = kx$.

De esta manera la onda habría sido reducida a una perturbación unidimensional.

 En sí cualquier onda tridimensional puede ser expresada como una combinación de ondas planas.

Nota: puede convenir profundizar en estos temas para lo que se recomienda ampliamente consultar el libro **Óptica de Hecht**.



4. Ondas Electromagnéticas

Las *Ecuaciones de Maxwell* predicen la existencia de ondas electromagnéticas. En el espacio libre o en un dieléctrico, los vectores de campo satisfacen la ecuación simple de onda. En un medio conductor hay una atenuación de las propagaciones electromagnéticas en el material por causa de la interacción entre la onda y las cargas libres del material.

Como resultado importante se tiene que en una onda plana el campo eléctrico y el magnético son perpendiculares entre sí: $\mathbf{E} \perp \mathbf{B}$, y además se encuentran en un plano que es perpendicular a su dirección de propagación. Las ondas electromagnéticas son transversales.

También se encuentra que las relaciones de fase entre $\mathbf{E}$ y $\mathbf{B}$ dependen de las propiedades de conductividad del medio.

4.1 Medios no conductores

En medios en los que no hay cargas ni corrientes libres, las ecuaciones de campo electromagnético son:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \quad [4.1.1]$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad [4.1.2]$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad [4.1.3]$$

$$\nabla \times \mathbf{B} - \frac{\epsilon\mu}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = 0 \quad [4.1.4]$$

Nota: también se pueden escribir en términos de los vectores:

$$\text{de Desplazamiento Eléctrico:} \quad \mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}$$

$$\text{y de Intensidad de Campo Magnético:} \quad \mathbf{H} = \mathbf{B} / \mu.$$

Tomando el rotacional de [4.1.3]:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \nabla \times \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \mathbf{0}$$

Lo cual cambia el orden de las derivadas espacial y temporal.

Usando las *identidades de operadores vectoriales* y sustituyendo $\nabla \times \mathbf{B}$ en la ecuación [4.1.4] se tiene:

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\epsilon \mu}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right) = 0$$

pero $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$, $\Rightarrow$

$$\boxed{\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{\epsilon \mu}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0} \quad [4.1.5]$$

y realizando las operaciones análogas para la ecuación [4.1.4], se tiene:

$$\boxed{\nabla^2 \mathbf{B} - \frac{\epsilon \mu}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = 0} \quad [4.1.6]$$

Ambas ecuaciones, [4.1.5] y [4.1.6] son ecuaciones de onda. Del coeficiente de las derivadas temporales se ve que la velocidad de propagación de las ondas es $V = c / \sqrt{\epsilon \mu}$. Debido a que en la mayoría de los materiales $\epsilon > 1$ y $\mu \approx 1$, la velocidad de propagación en esos medios es $< c \approx 3 \times 10^8 \text{ m/s}$, que es la velocidad de la luz en el espacio (para la cual $\epsilon = 1$, $\mu = 1$).

Las ecuaciones [4.1.5] y [4.1.6] son vectoriales, de modo que son válidas para cada componente rectangular.

Para las soluciones de ondas planas, se elige la dirección de propagación perpendicular $\hat{e}_x$.

$\Rightarrow$ en general para cada componente se tiene:

$$\frac{\delta^2 \psi}{\delta x^2} - \frac{1}{V^2} \frac{\delta^2 \psi}{\delta t^2} = 0 \quad [4.1.7]$$

donde

$$V = \frac{c}{\sqrt{\epsilon \mu}} \quad [4.1.8]$$

La solución general de la ecuación de onda unidimensional es una combinación de funciones arbitrarias de las variables $x + Vt$ y $x - Vt$:

$$\psi(x, t) = f(x + Vt) + g(x - Vt) \quad [4.1.9]$$

La función $f(x + Vt)$ representa una forma de onda propagándose en la dirección $-\hat{e}_x$, y la otra, $g(x - Vt)$ en la opuesta.

$$\psi(x, t) \sim e^{ik(x-Vt)} = e^{i(kx - \omega t)} = \text{Cos}(kx - \omega t) + i \text{Sen}(kx - \omega t) \quad [4.1.10]$$

donde k es la constante de propagación, o número de onda:

$$k = \frac{\omega}{V} = \frac{\omega \sqrt{\epsilon \mu}}{c} = n \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda} \quad [4.1.11]$$

con $\omega = 2\pi/\tau$; y τ es el periodo, el índice de refracción definido por la razón de velocidades c/V se puede escribir como:

$$n = \sqrt{\epsilon \mu} \quad [4.1.12]$$

lo cual establece una la conexión entre el enfoque electromagnético y el óptico.

La ecuación [4.1.11] representa una onda monocromática.

Por lo general las propiedades del medio (n , ϵ y μ) son funciones de la frecuencia, caso en el que se dice que el medio es dispersivo.

Para considerar una dirección de propagación más general se define $|\mathbf{k}| = k$ perpendicular al frente de onda. De modo que para una dirección arbitraria se tiene:

$$\psi(\mathbf{r}, t) \sim e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad [4.1.13]$$

El vector $\mathbf{k}$ se conoce como vector de propagación de la onda.

Se sigue de la ecuación [4.1.13] que puede escribirse una onda electromagnética plana, monocromática en la forma:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad [4.1.14]$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{B}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad [4.1.15]$$

donde las amplitudes $\mathbf{E}_0$ y $\mathbf{B}_0$ son vectores constantes. La derivada en el tiempo de una onda así es simple:

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = -i\omega \mathbf{E} \quad [4.1.16]$$

Además, se tiene que:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{E} &= \frac{\partial}{\partial x} [E_{0x} e^{i(k_{xx} + k_{yy} + k_{zz} - \omega t)}] + \dots \\ \therefore \nabla \cdot \mathbf{E} &= ik_x E_{0x} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + \dots = i\mathbf{k} \cdot \mathbf{E} \end{aligned} \quad [4.1.17]$$

y también:

$$\nabla \times \mathbf{E} = \hat{\mathbf{e}}_x \left\{ \frac{\partial}{\partial y} [E_{0x} e^{i(k_{xx} + k_{yy} + k_{zz} - \omega t)}] - \frac{\partial}{\partial z} [E_{0x} e^{i(k_{xx} + k_{yy} + k_{zz} - \omega t)}] \right\} + \dots$$

$$\therefore \nabla \times \mathbf{E} = i\mathbf{k} \times \mathbf{E} \quad [4.1.18]$$

Sustituyendo las ecuaciones de campo de onda plana [4.1.14] y [4.1.15], en las ecuaciones de campo [4.1.1-4], se obtiene:

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{E} = 0 \quad [4.1.19]$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{B} = 0 \quad [4.1.20]$$

$$\mathbf{k} \times \mathbf{E} - \frac{\omega}{c} \mathbf{B} = 0 \quad [4.1.21]$$

$$\mathbf{k} \times \mathbf{B} - \frac{\varepsilon\mu\omega}{c} \mathbf{E} = 0 \quad [4.1.22]$$

Nota: $\mathbf{k}$, $\mathbf{E}$ y $\mathbf{B}$ forman una base ortonormal.

Expresando las anteriores ecuaciones en términos del índice de refracción $n = \sqrt{\varepsilon\mu}$ y del vector unitario $\hat{\mathbf{e}}_x = \mathbf{k} / k$, las ecuaciones [4.1.21] y [4.1.22] se tiene:

$$\mathbf{B} = n\hat{\mathbf{e}}_x \times \mathbf{E} \quad [4.1.23]$$

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{n}\hat{\mathbf{e}}_x \times \mathbf{B} \quad [4.1.24]$$

Claramente, el vector de Poynting $\mathbf{S}$, proporcional a $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$, es paralelo a $\mathbf{k}$, y los campos eléctrico y magnético oscilan en fase.

La onda puede se puede describir como la superposición de dos ondas con la misma frecuencia y amplitud, pero con vectores de propagación $\mathbf{k}$ en direcciones opuestas alcanzando un máximo de $\pi/2$ de desfaseamiento en el espacio y en el tiempo.

La relación entre las amplitudes de campo en un medio lineal es:

$$|\mathbf{B}_0| / |\mathbf{E}_0| = n \equiv \sqrt{\varepsilon\mu} \quad [4.1.25]$$

$\Rightarrow$ para una onda plana en el espacio, las amplitudes eléctrica y magnética son iguales en **unidades Gaussianas** (en SI, $|\mathbf{B}_0|/|\mathbf{E}_0| = c$ en el espacio y c/n en un medio lineal).

Así:
$$|\mathbf{E}_0| / |\mathbf{H}_0| = \eta \equiv \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon}} \quad [4.1.26]$$

donde η es la *impedancia* del medio. Esta ecuación aparece igual tanto en *sistema Gaussiano* como en el SI.

La suposición de ondas monocromáticas no es restrictiva, ya que la linealidad de la ecuación de onda permite el tratamiento con una forma arbitraria descrita con la síntesis de Fourier.

Sin embargo, si la velocidad de la onda $V = c / \sqrt{\epsilon\mu}$ depende de la frecuencia, el fenómeno es llamado dispersión, la componente sinusoidal de la onda compleja viajará a diferentes velocidades $\Rightarrow$ su forma cambiará gradualmente (un pulso angosto se dispersará). Si el medio no es lineal, la onda sinusoidal genera armónicos y dos o más ondas se propagarán simultáneamente, generando suma y diferencia de frecuencias.

La ortogonalidad de los vectores de campo se rompe cuando la onda deja de ser plana, como ocurre cerca de una fuente o cuando el plano de la onda se refracta en un medio conductor. La ortogonalidad también se rompe en un medio anisotrópico o inhomogéneo, es decir, que ya no aplican las ecuaciones:

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{\epsilon\mu}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \quad [4.1.27]$$

y

$$\nabla^2 \mathbf{B} - \frac{\epsilon\mu}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = 0 \quad [4.1.28]$$

En ciertos casos uno de estos campos, más no el otro, puede ser perpendicular al vector de propagación $\mathbf{k}$. así se tienen las ondas TE (*Transversales Eléctricas*) o TM (*Transversales Magnéticas*) a diferencia de las ondas planas comunes que son TEM (*Transversales Electromagnéticas*). En medios complicados las direcciones de $\mathbf{k}$ y del vector de Poynting $\mathbf{S}$ pueden diferir por un ángulo amplio y hasta exceder $\pi/2$.

4.2 Polarización

El campo eléctrico de una onda plana se puede escribir como:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = (\hat{\mathbf{e}}_1 E_1 + \hat{\mathbf{e}}_2 E_2) e^{i(\mathbf{k}\zeta - \omega t)} \quad [4.2.1]$$

donde se supone la propagación es en la dirección $\hat{\mathbf{e}}_3$, y ζ es la medida de la distancia a lo largo de $\hat{\mathbf{e}}_3$. los vectores unitarios $\hat{\mathbf{e}}_1$ y $\hat{\mathbf{e}}_2$ son llamados *vectores de polarización*. Las cantidades $(\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2, \hat{\mathbf{e}}_3)$ forman una base ortonormal derecha.

Las amplitudes E_1 y E_2 son constantes complejas, de modo que contienen información relativa a las fases.

El campo eléctrico es la parte real de la expresión compleja [4.2.1].

Si E_1 y E_2 tienen la misma fase (el origen de tiempo puede elegirse de modo que sean puramente reales), la dirección de $\mathbf{E}$ es constante en el espacio y el tiempo, y la onda se llama **linealmente polarizada**.

Debido a que cualquier cantidad compleja puede ser expresada como el producto de una cantidad real y un factor de fase complejo se puede escribir:

$$E_1 = E_{10} e^{i\alpha} \quad [4.2.2]$$

$$E_2 = E_{20} e^{i\beta}$$

donde E_{01} y E_{02} son amplitudes reales.

Esto es equivalente a escribir dos soluciones linealmente independientes en las que $\mathbf{E}$ se construye como:

$$\mathbf{E}_1 = \hat{\mathbf{e}}_1 E_1 e^{i(k\zeta - \omega t)} = \hat{\mathbf{e}}_1 E_{10} e^{i(k\zeta - \omega t + \alpha)} \quad [4.2.3]$$

$$\mathbf{E}_2 = \hat{\mathbf{e}}_2 E_2 e^{i(k\zeta - \omega t)} = \hat{\mathbf{e}}_2 E_{20} e^{i(k\zeta - \omega t + \beta)}$$

que ilustra explícitamente la naturaleza de fase de α y β .

$$\Rightarrow \quad \mathbf{E} = (\hat{\mathbf{e}}_1 E_{10} e^{i\alpha} + \hat{\mathbf{e}}_2 E_{20} e^{i\beta}) e^{i(k\zeta - \omega t)} \quad [4.2.4]$$

Usualmente no interesa la magnitud de α y β sólo tiene significado su diferencia de fase. Si E_1 y E_2 tienen la misma fase, o fases que difieren en un múltiplo de π , $\Rightarrow \beta = \alpha \pm m\pi$, $m = 0, 1, 2, \dots$ y

$$\mathbf{E} = (\hat{\mathbf{e}}_1 E_{10} \pm \hat{\mathbf{e}}_2 E_{20}) e^{i(k\zeta - \omega t + \alpha)} \quad [4.2.5]$$

donde la dirección de $\mathbf{E}$ es independiente del tiempo, y $\Rightarrow$ la onda es linealmente polarizada.

El siguiente caso más simple es aquel en que $E_{10} = E_{20} \equiv E_{00}$, pero las fases difieren en $\pi/2$; y, por ejemplo, $\beta = \alpha \pm \pi/2$. $\Rightarrow$

$$\mathbf{E} = E_{00}(\hat{\mathbf{e}}_1 \pm \hat{\mathbf{e}}_2) e^{i(k\zeta - \omega t + \alpha)} \quad [4.2.6]$$

Que corresponde a la ecuación de una onda circularmente polarizada.

Por ejemplo, tomando $(\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2, \hat{\mathbf{e}}_3) = (\hat{\mathbf{e}}_x, \hat{\mathbf{e}}_y, \hat{\mathbf{e}}_z)$, $\Rightarrow$

$$\mathbf{E}_x = E_{00} e^{i(kz - \omega t + \alpha)} \quad [4.2.7]$$

$$\mathbf{E}_y = \pm i E_{00} e^{i(kz - \omega t + \alpha)}$$

Y tomando las partes reales de estas expresiones:

$$\mathbf{E}_x = E_{00} \cos(\omega t - kz - \alpha) \quad [4.2.8]$$

$$\mathbf{E}_y = \pm E_{00} \sin(\omega t - kz - \alpha)$$

En un plano fijo $z = \text{constante}$, son justamente las ecuaciones paramétricas de un círculo. Viendo la onda de frente, la dirección de rotación está dada a la derecha o a la izquierda según el signo, en la expresión para E_y ($\beta = \alpha + \pi/2$ o $\beta = \alpha - \pi/2$), la rotación es en el sentido de las agujas del reloj y se dice que la onda está *polarizada circularmente a la izquierda*.

Si se toma el caso más general en el que $E_{01} \neq E_{02}$ y $\alpha \neq \beta \Rightarrow$

$$\mathbf{E}_x = E_{x0} e^{i(kz - \omega t + \alpha)} \quad [4.2.9]$$

$$\mathbf{E}_y = \pm E_{y0} e^{i(kz - \omega t + \beta)}$$

y tomando las partes reales:

$$\mathbf{E}_x = E_{x0} \cos(\omega t - kz - \alpha) \quad [4.2.10]$$

$$\mathbf{E}_y = E_{y0} \cos(\omega t - kz - \beta)$$

Definiendo $\gamma \equiv \beta - \pi/2$, se puede escribir $\Rightarrow$

$$\mathbf{E}_x = E_{x0} \cos(\omega t - kz - \alpha) \quad [4.2.11]$$

$$\mathbf{E}_y = E_{y0} \sin(\omega t - kz - \gamma)$$

Que tienen la forma del oscilador armónico bidimensional. El vector $\mathbf{E}$ traza una elipse en función del tiempo en los planos $z = \text{constante}$.

Las ecuaciones [4.1.23] y [4.1.24] permiten establecer de manera análoga la polarización del vector de campo magnético $\mathbf{B}$.

Usualmente se toma el campo eléctrico $\mathbf{E}$ como indicador de la polarización ya que interactúa más fuertemente con la materia.

4.3 Ondas planas en un medio conductor

Cuando el medio tiene conductividad σ , el campo eléctrico de la onda dirige una corriente de acuerdo con la ley de Ohm $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$. Se mantiene la suposición de que no hay cargas ni corrientes libres y de que el medio sigue siendo lineal, homogéneo e isotrópico. Las ecuaciones de Maxwell son $\Rightarrow$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \quad [4.3.1]$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad [4.3.2]$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad [4.3.3]$$

$$\nabla \times \mathbf{B} - \frac{\epsilon \mu}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{4\pi \sigma \mu}{c} \mathbf{E} \quad [4.3.4]$$

Que son idénticas a [4.1.1-4] excepto por la adición del término de corriente en el término de la derecha en la Ley de Ampere Maxwell. Nótese que las tres propiedades del medio (σ , ϵ , μ) solo aparecen en esta ecuación no en las otras.

Realizando la misma manipulación que la usada en la *Sección 4.1* (tomando el rotacional de cada ecuación rotacional y haciendo las sustituciones adecuadas), nuevamente se obtienen ecuaciones diferenciales idénticas para los dos campos:

$$\boxed{\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{4\pi \sigma \mu}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - \frac{\epsilon \mu}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0} \quad [4.3.5]$$

y

$$\boxed{\nabla^2 \mathbf{B} - \frac{4\pi \sigma \mu}{c^2} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} - \frac{\epsilon \mu}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = 0} \quad [4.3.6]$$

Cuando la conductividad es relativamente baja, el término correspondiente causa amortiguamiento o atenuación de la onda a medida que se propaga. En cambio, cuando la conductividad es muy grande, el término con la derivada de segundo orden se hace despreciable, y las ecuaciones se convierten en ecuaciones de difusión.

Se consideran soluciones de ondas planas que varían armónicamente en el tiempo y el espacio:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \rightarrow \mathbf{E}_0 e^{i(k\zeta - \omega t)} \quad [4.3.7]$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \rightarrow \mathbf{B}_0 e^{i(k\zeta - \omega t)} \quad [4.3.8]$$

donde, como antes, ζ es la medida de la distancia perpendicular al frente de onda desde el origen. Sustituyendo estas formas de onda en las ecuaciones [4.3.5-6] se tiene:

$$\left(k^2 - i \frac{4\pi\sigma\mu\omega}{c^2} - \frac{\varepsilon\mu\omega^2}{c^2} \right) \mathbf{E}_0 e^{i(k\zeta - \omega t)} \quad [4.3.9]$$

y una ecuación similar para $\mathbf{B}_0$.

Debido a que este resultado debe ser válido para una $\mathbf{E}_0$, la constante de separación (número de onda) debe satisfacer la **relación de dispersión**.

$$\boxed{k^2 = \frac{\varepsilon\mu\omega^2}{c^2} \left(1 - i \frac{4\pi\sigma\mu\omega}{c^2} \right)} \quad [4.3.10]$$

Así, se tiene que, cuando se añade la conductividad, la constante de propagación se vuelve compleja (lo cual queda indicado con el formato de cursiva).

$$\Rightarrow \quad k^2 \equiv \alpha + i\beta \quad [4.3.11]$$

Entonces la variación espacial se convierte en:

$$e^{ik\zeta} = e^{\beta\zeta} e^{i\alpha\zeta} \quad [4.3.12]$$

La parte real de k da la periodicidad espacial ($\alpha = 2\pi/\lambda$), mientras que la parte imaginaria da el amortiguamiento (la exponencial real). La amplitud de la onda decrece por un factor de e en la distancia $1/\beta$.

Cuando la variación en el tiempo es periódica, la derivada temporal se reduce a una multiplicación por $(-i\omega)$, $\Rightarrow$ de acuerdo con la ecuación [4.3.4]:

$$\nabla \times \mathbf{B} - \left(\varepsilon + i \frac{4\pi\sigma}{\omega} \right) \frac{\mu}{c} (-i\omega) \mathbf{E} = 0 \quad [4.3.13]$$

$\Rightarrow$ se puede definir la constante dieléctrica como:

$$\boldsymbol{\varepsilon} \equiv \varepsilon + i \frac{4\pi\sigma}{\omega} \quad [4.3.14]$$

Al rehacer el análisis de la *Sección 4.1* sustituyendo el complejo ε (para un medio conductor) en vez de la simple constante dieléctrica ε (para un medio no conductor). Además, la ecuación [4.3.8] se puede escribir como [4.3.10] pero con k y ε complejos:

$$k = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon \mu} \quad [4.3.15]$$

Más aún, se puede definir el índice de refracción complejo como:

$$\boxed{n = \sqrt{\epsilon \mu}} \quad [4.3.16]$$

Sustituyendo el complejo n en las ecuaciones [4.1.23-24] se tiene:

$$\mathbf{B} = n \hat{\mathbf{e}}_k \times \mathbf{E} \quad [4.3.17]$$

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{n} \hat{\mathbf{e}}_k \times \mathbf{B} \quad [4.3.18]$$

Cuando el índice de refracción es complejo las componentes del campo eléctrico y magnético no están en fase.

Para trabajar con la fase en detalle, se describen k y n en forma polar:

$$k = n \frac{\omega}{c} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon \mu} = \alpha + i\beta = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} e^{i\phi} \quad [4.3.19]$$

$\Rightarrow$ sustituyendo la constante dieléctrica compleja ϵ y tomando el valor absoluto:

$$|k| = \left| \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon \mu} \right| = \left| \frac{\omega}{c} \sqrt{\left(\epsilon + i \frac{4\pi\sigma}{\omega} \right) \mu} \right| = \frac{\omega \sqrt{\epsilon \mu}}{c} \left[1 - \left(\frac{4\pi\sigma}{\omega \epsilon} \right)^2 \right]^{\frac{1}{4}} \quad [4.3.20]$$

$$\phi = \tan^{-1} \left(\frac{\beta}{\alpha} \right) = \frac{1}{2} \tan^{-1} \left(\frac{4\pi\sigma}{\omega \epsilon} \right) \quad [4.3.21]$$

De modo que existe un retardo de $\mathbf{B}$ respecto de $\mathbf{E}$ dado por el ángulo de fase ϕ :

$$|\mathbf{B}| = |n| |\mathbf{E}| = \sqrt{\epsilon \mu} \left[1 - \left(\frac{4\pi\sigma}{\omega \epsilon} \right)^2 \right]^{\frac{1}{4}} |\mathbf{E}| \quad [4.3.22]$$

Nota: la impedancia del medio está dada por $\eta = \sqrt{\mu / \epsilon}$ y también resulta ser compleja.

Entonces de [4.3.20] se tiene que:

$$k = \frac{\omega}{c} \sqrt{\left(\epsilon + i \frac{4\pi\sigma}{\omega} \right) \mu} \quad [4.3.23]$$

De donde se desprenden dos casos:

CASO 1: Baja conductividad, $4\pi\sigma \ll \epsilon\omega$. La corriente de conducción es mucho menor que la corriente de desplazamiento. Esta situación puede ocurrir para conductores moderadamente buenos a altas frecuencias. $\Rightarrow$ expandiendo la ecuación [4.3.23], se tiene:

$$k \approx \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon\mu} \left(1 + i \frac{2\pi\sigma}{\epsilon\omega} + \dots \right) \quad [4.3.24]$$

Ya que, por el desarrollo en serie de Maclaurin se tiene que:

$$(1+x)^m = 1 + mx + \frac{m(m-1)}{2!} x^2 + \dots$$

$\Rightarrow \text{Re } k = 2\pi/\lambda$ y $\text{Im } k \approx \frac{2\pi\sigma}{c} \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon}}$. de donde se tiene que la **distancia de atenuación** $1/\text{Im } k$ es independiente de la frecuencia (excepto por la posible dependencia de la conductividad).

CASO 2: Alta conductividad, $4\pi\sigma \gg \epsilon\omega$. La corriente de conducción es mucho más grande que la corriente de desplazamiento. Este caso aplica a la mayoría de los metales en los casos de frecuencias de radio, microondas, infrarrojo, visible y U.V. En este caso la constante dieléctrica compleja se vuelve esencialmente un imaginario puro.

De modo que $\text{Re } k \approx \text{Im } k \approx \frac{1}{c} \sqrt{2\pi\mu\sigma\omega}$. Por lo que resulta que la onda es fuertemente amortiguada (se convierte más en un proceso de difusión que en uno ondulatorio).

De aquí se define la profundidad de penetración (*skin depth*) como:

$$\delta \equiv \frac{c}{\sqrt{2\pi\mu\sigma\omega}} \quad [4.3.25]$$

De la ecuación [4.3.21] se tiene que, en un medio conductor, el campo magnético mantiene un retardo respecto del campo eléctrico de $\phi = \pi/4$ y de la ecuación [4.3.22] se obtiene que la magnitud del campo magnético es mayor que la del campo eléctrico. $\Rightarrow$ dado que la densidad de energía del medio es mayormente magnética, para $\omega \rightarrow 0$, la densidad de energía es enteramente magnética, en correspondencia con el principio de que un conductor no puede soportar un campo eléctrico.

4.4 Potenciales y campos retardados

La radiación se produce cuando hay cargas aceleradas.

POTENCIALES RETARDADOS:

El potencial de retardo (o potencial retardado) representa los **potenciales eléctrico** $\mathbf{V}$ y **magnético** $\mathbf{A}$ en un punto, considerando el tiempo que tarda la información de carga o corriente en propagarse a la velocidad de la luz c desde la fuente.

Los potenciales escalar y vectorial para los campos estáticos eléctrico y magnético, respectivamente, pueden ser calculados a partir de las siguientes ecuaciones:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \int_V \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dv' \quad [4.4.1]$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{c} \int_V \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dv' \quad [4.4.2]$$

Donde aplican para una distribución de carga y de corriente estáticas; y se siguen de la Condición de Lorentz:

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \Phi}{\partial t} \quad [4.4.3]$$

Para el caso en que las distribuciones de carga y corriente tienen una dependencia en el tiempo el cálculo de los potenciales requiere de la consideración del **tiempo de retardo**:

$$t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c} \quad [4.4.4]$$

$\Rightarrow$ se puede escribir:

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \int_V \frac{\rho\left(\mathbf{r}', t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}\right)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dv' \quad [4.4.5]$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c} \int_V \frac{\mathbf{J}\left(\mathbf{r}', t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}\right)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dv' \quad [4.4.6]$$

Que se conocen como **potenciales retardados**.

Nota: se supondrá que $\rho(\mathbf{r}')$ y $\mathbf{J}(\mathbf{r}')$ existen en el espacio vacío.

A continuación, se prueba que estos potenciales son soluciones de las *ecuaciones inhomogéneas* para los potenciales [4.4.5-6]:

La ecuación de onda inhomogénea para Φ es:

$$\nabla^2 \Phi(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = -4\pi\rho \quad [4.4.7]$$

Dividiendo el volumen de integración de [4.4.5] en dos regiones: $V = V_1 + V_2$, donde V_1 encierra una vecindad del punto de observación localizado con el vector $\mathbf{r}$. Así el potencial queda compuesto por dos partes:

$$\Phi = \Phi_1 + \Phi_2 \quad [4.4.8]$$

Haciendo $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ se puede escribir:

$$\Phi_i(\mathbf{r}, t) = \int_V \frac{\rho\left(\mathbf{r}', t - \frac{R}{c}\right)}{R} dv' \quad [4.4.9]$$

Eventualmente se toma $V_1 \rightarrow 0 \Rightarrow \rho(\mathbf{r}', t - R/c) \rightarrow \rho(\mathbf{r}', t)$. De modo que:

$$\Phi_1(\mathbf{r}, t) = \int_V \frac{\rho(\mathbf{r}', t)}{R} dv' \quad [4.4.10]$$

Ya que la expresión es idéntica a la del caso estático Φ es solución de la *ecuación de Poisson* y se tiene:

$$\nabla^2 \Phi_1(\mathbf{r}, t) = -4\pi\rho(\mathbf{r}, t) \quad [4.4.11]$$

Nótese que el argumento de ρ ahora es $\mathbf{r}$, y no $\mathbf{r}'$.

La función de distancia R y también el integrando de [4.4.9] son esféricamente simétricos en el punto del campo $\mathbf{r}$ con respecto a un elemento de carga en el punto fuente fijo $\mathbf{r}'$. Entonces, el laplaciano con respecto a las coordenadas $\mathbf{r}$ del integrando es simplemente:

$$\nabla^2 \left(\frac{\rho}{R} \right) = \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left[R^2 \frac{\partial}{\partial R} \left(\frac{\rho}{R} \right) \right] = \frac{1}{R} \frac{\partial^2 \rho}{\partial R^2} \quad [4.4.12]$$

$\Rightarrow$

$$\nabla^2 \Phi_1(\mathbf{r}, t) = \int_{V_2} \nabla^2 \left\{ \frac{\rho(\mathbf{r}', t - R/c)}{R} \right\} dv' = \int_{V_2} \frac{1}{R} \frac{\partial^2}{\partial R^2} \rho(\mathbf{r}', t - R/c) dv' \quad [4.4.13]$$

Ahora, una función arbitraria de la variable $t - R/c$ es una solución unidimensional de la ecuación de onda. La densidad de carga $\rho = \rho(\mathbf{r}', t - R/c)$ es una función, de modo que se puede escribir:

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial R^2} - \frac{1}{c} \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = 0 \quad [4.4.14]$$

Sustituyendo por $\partial^2 \rho / \partial R^2$ en la ecuación [4.4.13], se obtiene:

$$\nabla^2 \Phi_1(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c^2} \int_{V_2} \frac{1}{R} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \rho(\mathbf{r}', t - R/c) dv' \quad [4.4.15]$$

Intercambiando las derivadas espacial y temporal, se tiene que:

$$\nabla^2 \Phi_1(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \int_{V_2} \frac{1}{R} \rho(\mathbf{r}', t - R/c) dv' \quad [4.4.16]$$

La integral en esta ecuación es tan solo $\Phi(\mathbf{r}, t)$ si se hace que $V_1 \rightarrow 0 \Rightarrow V_2 \rightarrow V$. Entonces en el límite se tiene que:

$$\nabla^2 \Phi_1(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} \quad [4.4.17]$$

Sumando las ecuaciones [4.4.11] y [4.4.17], se obtiene:

$$\nabla^2 \Phi = \nabla^2 (\Phi_1 - \Phi_2) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} - 4\pi \quad [4.4.18]$$

De modo que la prueba está completa; y el potencial retardado se muestra ahora como una solución de la ecuación de onda inhomogénea.

La solución para:

$$\Phi'(\mathbf{r}, t) = \int_V \frac{\rho\left(\mathbf{r}', t + \frac{R}{c}\right)}{R} dv' \quad [4.4.19]$$

Es equivalente y se conoce como potencial adelantado y no corresponde a una situación física aceptable.

Para lo que resta, cuando una cantidad vaya a ser evaluada en el tiempo retardado $t - R/c$, se usará frecuente mente la notación siguiente:

$$\rho(\mathbf{r}', t - R/c) \equiv [\rho(\mathbf{r}')] \quad [4.4.20]$$

Los potenciales retardados en la aproximación de Lorentz pueden escribirse de manera compacta como:

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \int_V \frac{[\rho(\mathbf{r}')] }{R} dv' \quad [4.4.21]$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \int_V \frac{[\mathbf{J}(\mathbf{r}')] }{R} dv' \quad [4.4.22]$$

CAMPOS RETARDADOS:

Se pueden usar los potenciales retardados para expresar los campos eléctrico y magnético, en términos de fuentes retardadas para hacer la generalización de las leyes de Coulomb y de Biot–Savart con una dependencia temporal arbitraria de ρ y $\mathbf{J}$.

El campo eléctrico se calcula a partir de los potenciales por:

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad [4.4.23]$$

La derivada temporal de la ecuación [4.4.22] es directa, operando únicamente sobre $\mathbf{J}$ en el integrando. Pero el gradiente (con respecto a la coordenada del campo $\mathbf{r}$) de la ecuación [4.4.21] es más sutil debido a que el potencial el tiempo retardado es una función implícita de $\mathbf{r}$. Mediante una identidad de operador vectorial se puede obtener la expansión:

$$\nabla\left(\frac{[\rho]}{R}\right) = \left(\frac{1}{R}\right) \nabla[\rho] + [\rho] \nabla\left(\frac{1}{R}\right) \quad [4.4.24]$$

Nuevamente, $\nabla(1/R) = -\mathbf{e}_R/R^2$ es directo, mientras que $\mathbf{e}_R$ es el vector unitario correspondiente a $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ (esto es, desde la fuente en el punto $\mathbf{r}'$ al punto del campo $\mathbf{r}$). Debido a la dependencia del tiempo retardado el otro término se evalúa como:

$$\nabla[\rho(\mathbf{r}', t_{\text{ret}})] = \left[\frac{\partial \rho}{\partial t}\right] \nabla\left(t - \frac{1}{c}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|\right) = -\frac{1}{c} \left[\frac{\partial \rho}{\partial t}\right] \mathbf{e}_R \quad [4.4.25]$$

Poniendo las partes juntas, se tiene la **ley generalizada de Coulomb–Faraday**:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \int_V \left(\frac{[\rho]\mathbf{e}_R}{R^2} + \frac{[\partial \rho / \partial t]\mathbf{e}_R}{cR} - \frac{[\partial \mathbf{J} / \partial t]}{c^2 R} \right) dv' \quad [4.4.26]$$

Claramente, esta se reduce a la ley fundamental de Coulomb, en el límite estático. El término $\partial \mathbf{J} / \partial t$ representa el **campo eléctrico de Faraday**.

El campo magnético esta dado por:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad [4.4.27]$$

Por la identidad del operador vectorial, el rotacional del integrando de [4.4.22] se expande a:

$$\nabla \times \left(\frac{[\mathbf{J}]}{R} \right) = \left(\frac{1}{R} \right) \nabla \times [\mathbf{J}] - [\mathbf{J}] \times \nabla \left(\frac{1}{R} \right) \quad [4.4.28]$$

Entonces el rotacional de la corriente $\mathbf{J}$ retardada es:

$$\nabla \times [\mathbf{J}] = \left[\frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} \right] \times \nabla \left(t - \frac{1}{c} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \right) = \frac{1}{c} \left[\frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} \right] \times \mathbf{e}_R \quad [4.4.29]$$

De donde se obtiene la *ley generalizada de Biot-Savart*:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \int_V \left(\frac{[\mathbf{J}] \times \mathbf{e}_R}{cR^2} + \frac{[\partial \mathbf{J} / \partial t] \times \mathbf{e}_R}{cR^2} \right) dv' \quad [4.4.30]$$

Las ecuaciones [4.4.26] y [4.4.30] expresan los campos en términos de las fuentes retardadas ρ y $\mathbf{J}$ con toda generalidad. Estas muestran que en la ley de Coulomb y la de Biot-Savart el efecto del retardo es menos importante de lo que se espera.

Usando la serie de Taylor para expresar la densidad de corriente $\mathbf{J}$ en el tiempo presente t en términos de la fuente y de sus derivadas en el tiempo de retardo $t_{\text{ret}} = t - R/c$:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = [\mathbf{J}(\mathbf{r}_{\text{ret}})] + \left[\frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} \right]_{t_{\text{ret}}} \left(\frac{R}{c} \right) + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 \mathbf{J}}{\partial t^2} \right]_{t_{\text{ret}}} \left(\frac{R}{c} \right)^2 + \dots \quad [4.4.31]$$

El integrando claramente incluye los dos primeros términos de esta serie. Esto es, la fórmula de Biot-Savart para el tiempo presente. El mismo argumento aplica a la densidad de carga.

Por otro lado, cuando la variación en el tiempo es rápida, ambos campos son dominados por los términos $\partial \mathbf{J} / \partial t$, que representan la carga acelerada, estos términos representan la radiación electromagnética.

Desde el punto de vista relativista, ambos campos son componentes de un tensor de 4 dimensiones. Desde este punto de vista ninguno de los campos produce al otro, ambos son causados por cargas y corrientes.

4.5 Radiación de una carga acelerada

Si la velocidad de una partícula es suficientemente pequeña en comparación con c , como para no ser tomada en cuenta ($\beta \ll 1$ y $k \rightarrow 1$), entonces los campos de aceleración se pueden escribir como:

$$\mathbf{E}_a = \frac{e}{c^2 R^3} \{\mathbf{R} \times (\mathbf{R} \times \mathbf{a})\} = \frac{e}{c^2 R^3} \{(\mathbf{R} \cdot \mathbf{a})\mathbf{R} - R^2 \mathbf{a}\} \quad [4.5.1]$$

$$\mathbf{B}_a = \frac{\mathbf{R} \times \mathbf{E}_a}{R} = \mathbf{n} \times \mathbf{E}_a \quad [4.5.2]$$

$\Rightarrow$

$$\mathbf{E}_a \times \mathbf{B}_a = \frac{\mathbf{E}_a \times (\mathbf{R} \times \mathbf{E}_a)}{R} = \frac{1}{R} \{\mathbf{E}_a^2 \mathbf{R} - (\mathbf{E}_a \cdot \mathbf{R})\mathbf{E}_a\} \quad [4.5.3]$$

Porque $\mathbf{E}_a$ es perpendicular a $\mathbf{R}$, el segundo término en la ecuación [4.5.3] se anula, y

$$\mathbf{E}_a \times \mathbf{B}_a = E_a^2 \mathbf{n} \quad [4.5.4]$$

Ya que la porción del vector de Poynting que contribuye a la radiación es:

$$\mathbf{S}_a = \frac{c}{4\pi} (\mathbf{E}_a \times \mathbf{B}_a) = \frac{c}{4\pi} E_a^2 \mathbf{n} \quad [4.5.5]$$

Elevando al cuadrado la ecuación [4.5.1] se tiene entonces:

$$E_a^2 = \frac{e^2 a^2}{c^4 R^2} (1 - \cos^2 \theta) = \frac{e^2 a^2}{c^4 R^2} \sin^2 \theta \quad [4.5.6]$$

$\Rightarrow$

$$\mathbf{S}_a = \frac{e^2 a^2 \sin^2 \theta}{4\pi c^3 R^2} \mathbf{n} \quad [4.5.7]$$

Ya que el vector de Poynting representa el flujo de energía por unidad de tiempo, se puede expresar la distribución angular de la radiación como la potencia radiada por unidad de ángulo sólido multiplicando $\mathbf{S}_a \cdot \mathbf{n}$ por R^2 .

Entonces,

$$\frac{dP}{d\Omega} = (\mathbf{S}_a \cdot \mathbf{n}) R^2 = \frac{e^2 a^2}{4\pi c^3} \sin^2 \theta \quad [4.5.8]$$

5. Ondas y partículas

La mecánica cuántica juega un papel fundamental en la descripción y el entendimiento de los fenómenos naturales. De hecho, en los fenómenos que ocurren en una escala muy pequeña (atómica y subatómica). Por ejemplo, la existencia y propiedades de los átomos, los enlaces químicos y la propagación de un electrón en un cristal no pueden ser entendidos en términos de la mecánica clásica. Sin embargo, hay muchos fenómenos que revelan, en la escala macroscópica, el comportamiento cuántico de la naturaleza.

Históricamente, la cuántica ha contribuido a la unificación de conceptos fundamentales de la física, tratando a las partículas materiales y a la radiación de la misma manera. Las leyes clásicas (de Newton y Maxwell) dejan de ser válidas para cuerpos que viajan a velocidades, próximas a la de la luz (*dominio relativista*) y para elementos de materia pequeños comparables con los átomos (*dominio cuántico*). Por ello la teoría cuántica se hace indispensable para comprender la naturaleza intrínseca de los cuerpos sólidos y los valores de sus parámetros macroscópicos (*densidad, calor específico, elasticidad, etc.*).

En la actualidad aún no se cuenta con una teoría que unifique satisfactoriamente la mecánica relativista y la cuántica. Sin embargo, la mayoría de los fenómenos atómicos y moleculares se explican bien con la mecánica cuántica no-relativista, aunque los electrones orbiten a velocidades relativistas en torno a los núcleos atómicos, sus propiedades no pueden ser del todo explicadas ni por la Mecánica Cuántica que pierde resolución ni por la Relatividad que no puede penetrar en la escala de Planck. Así nuevas teorías están emergiendo para tratar de conectar al Espacio Tiempo con el Campo Electromagnético y unificar la física a través de entender el universo en escalas más pequeñas aun.

5.1 Cuanto de luz y relaciones de Planck-Einstein

Newton consideró a la luz como haz de partículas. En la primera mitad del siglo XIX, la naturaleza ondulatoria de la luz fue demostrada (interferencia y difracción). Esto permitió a la óptica integrarse a la teoría electromagnética. En este marco conceptual, la velocidad de la luz está relacionada con constantes eléctricas y magnéticas, y el fenómeno de polarización se interpreta como una manifestación del carácter vectorial del campo eléctrico.

El estudio del fenómeno de radiación de *cuerpo negro*, que la teoría electromagnética no puede explicar, permitió a Planck sugerir la hipótesis de la *cuantización de la energía* (1900): para una onda electromagnética de frecuencia ν , las únicas energías posibles están integradas por múltiplos de un *quantum* $h\nu$, donde h es una constante universal. Generalizando esta hipótesis, Einstein propuso un regreso a la teoría de partículas (1905): *la luz consiste en un haz de fotones, cada uno con una energía $h\nu$* . Einstein mostró que la introducción de los fotones hace posible entender, de una manera muy simple, el efecto fotoeléctrico. Pasaron 20 años para que se demostrará la existencia de los fotones, lo cual se logró mediante el efecto Compton (1924).

Lo anterior permite establecer las siguientes conclusiones: la interacción de las ondas electromagnéticas con la materia ocurre mediante *procesos elementales indivisibles*, en los que la radiación aparece compuesta de partículas, fotones. Los parámetros de las partículas (la *energía* E y el *momentum* $\mathbf{p}$ de un fotón) y los parámetros de las ondas (frecuencia angular $\omega = 2\pi\nu$ y el vector de onda $\mathbf{k}$, donde $|\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$, con ν la frecuencia y λ la longitud de onda) están ligados por las relaciones fundamentales:

$E = h\nu = \hbar\omega$ $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$	Relaciones de Planck-Einstein [5.1.1]
---	--

Donde $\hbar \equiv h/2\pi$ se define en términos de la *constante de Planck*:

$$h \approx 6.62 \times 10^{-34} \text{ Joules} \cdot \text{segundo} \quad [5.1.2]$$

Durante cada proceso elemental, la *energía* y el *momento total* deben conservarse.

5.2 Dualidad onda-partícula

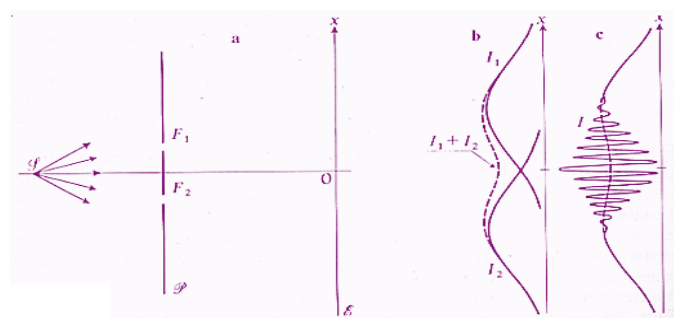
Los fenómenos típicos ondulatorios como son la interferencia y la difracción no pueden ser explicados en términos de partículas. Al analizar el experimento de la doble rendija de Young se llega a la siguiente conclusión: una interpretación completa del fenómeno puede obtenerse únicamente conservando ambos aspectos (onda y partículas) de la interpretación de la luz. La aparente paradoja puede ser resuelta con la introducción de los conceptos fundamentales de la mecánica cuántica.

EXPERIMENTO DE LA DOBLE RENDIJA DE YOUNG:

En el dispositivo experimental una onda de luz monocromática es emitida por la fuente $\mathcal{S}$ hacia la pantalla opaca $\mathcal{P}$ en la que se han practicado dos ranuras angostas F_1 y F_2 , que iluminan la pantalla de observación $\mathcal{E}$ (placa fotográfica).

Si se bloquea F_2 , se obtiene en $\mathcal{E}$ la distribución de intensidad $I_1(x)$ que es el patrón de difracción de F_1 .

De la misma manera, cuando se obstruye F_1 , el patrón de difracción de F_2 queda descrito por $I_2(x)$.



Cuando están abiertas al mismo tiempo ambas ranuras, se observa un sistema de franjas de interferencia en la pantalla. En particular, la intensidad correspondiente $I(x)$ no es la suma de las intensidades producidas por F_1 y F_2 por separado:

$$I(x) \neq I_1(x) + I_2(x) \quad [5.2.1]$$

La existencia de un patrón de difracción cuando solo una de las ranuras se encuentra abierta puede explicarse considerando las colisiones de los fotones con los bordes de la ranura, aunque tal explicación debe hacerse de manera más precisa y un estudio más detallado muestra que tal explicación es insuficiente.

Ahora bien, el fenómeno de interferencia se puede intentar explicar con la interacción entre los fotones que pasan a través de **las 2 ranuras**. Entonces, si la intensidad de la fuente S (*número de fotones emitidos por segundo*) es disminuido hasta que prácticamente choquen con la pantalla uno a uno, la interacción entre los fotones debe disminuir y, eventualmente, hacerse nulo. **¡Las franjas de interferencia deberían desaparecer!**

Antes de dar la explicación, conviene recordar que la teoría ondulatoria da una interpretación completamente natural de las franjas de interferencia. La intensidad de la luz en un punto de la pantalla es proporcional al cuadrado de la amplitud del campo eléctrico en ese punto. Si $E_1(x)$ y $E_2(x)$ representan, en notación compleja, los campos eléctricos producidos en el punto x por las ranuras F_1 y F_2 respectivamente (las ranuras van a ser como fuentes secundarias), la resultante del campo eléctrico en ese punto cuando ambas ranuras están abiertas es:

$$E(x) = E_1(x) + E_2(x) \quad [5.2.2]$$

Usando notación compleja, se tiene:

$$I(x) \propto |E(x)|^2 = |E_1(x) + E_2(x)|^2 \quad [5.2.3]$$

Ya que las intensidades $I_1(x)$ y $I_2(x)$ son proporcionales, respectivamente, a $|E_1(x)|^2$ y $|E_2(x)|^2$, la fórmula [5.2.1] muestra que $I(x)$ difiere de $I_1(x) + I_2(x)$ por un término de interferencia que depende de la diferencia de fases entre E_1 y E_2 , y cuya presencia explica las franjas. La teoría de ondas predice que la disminución de la intensidad de la fuente S causa una disminución de la intensidad de las franjas más no su desaparición.

De cualquier manera, se deben tener en mente las siguientes consideraciones:

- (i) Si se cubre la pantalla con una placa fotográfica y se incrementa el tiempo de exposición para capturar un número grande de fotones, se observa que las franjas no desaparecen, así que la pura interpretación corpuscular, de acuerdo con la interacción entre fotones debe ser desechada.

- (ii) Se puede exponer la placa fotográfica durante un tiempo corto, de modo que solo pueda recibir pocos fotones. Entonces, se observa que cada fotón produce un impacto localizado y no un patrón de interferencia débil, de modo que la sola interpretación ondulatoria también debe ser desechada.

En realidad, a medida que más y más fotones chocan con la placa, el siguiente fenómeno ocurre: los impactos individuales aparecen distribuidos de manera aleatoria, y solo cuando un número grande de estos han alcanzado la pantalla la distribución de los impactos comienzan a tener un aspecto continuo. La densidad de los impactos en cada punto de la pantalla corresponde a las franjas de interferencia, máxima en la franja más brillante y cero en la más oscura. Se puede decir que: ***¡a medida que los fotones van llegando a la pantalla van construyendo el patrón de interferencia!***

UNIFICACIÓN DE LOS DOS ASPECTOS DE LA LUZ:

El análisis anterior muestra que es imposible explicar el fenómeno en la *doble rendija* considerando solo uno de los dos aspectos de la luz, onda o partículas. Para poder explicarlo se requiere pasar a un nuevo dominio teórico que permita un enfoque crítico de la conceptualización clásica. Una característica esencial del nuevo dominio es que *cuando se realiza una medición en un sistema microscópico, se afecta a tal sistema*. En el dominio macroscópico siempre es posible concebir dispositivos de medición cuya influencia sobre el sistema sea tan débil como uno quiera, pero en el dominio microscópico simplemente es un reto casi infranqueable muy a pesar de las nuevas tecnologías de medición.

Un análisis del experimento de Young permite deducir que es imposible detectar la ranura por la que pasan los fotones sin evitar que lleguen a la pantalla. Por tanto, no se puede conocer realmente la trayectoria de estos; y como los fotones no pueden ser emitidos bajo las mismas condiciones no se puede saber dónde impactarán con la pantalla. Solo puede asegurarse que cuando un fotón es emitido la probabilidad de que choque con la pantalla en el punto x es proporcional a la intensidad $I(x)$ calculada usando la teoría de ondas, esto es, $|E(x)|^2$.

Por todo lo anterior (y muchos otros esfuerzos) se ha formulado el concepto de *dualidad onda-partícula*:

- (i) Los aspectos de onda y partícula de la luz son inseparables. La luz se comporta como una onda y como un flujo de partículas, la onda permite calcular la probabilidad de manifestación de las partículas.
- (ii) Las predicciones sobre el comportamiento de los fotones solo pueden hacerse de manera probabilística.
- (iii) La información acerca de los fotones al tiempo t está dada por la onda $E(\mathbf{r}, t)$, que es una solución de la ecuación de Maxwell. Entonces la *amplitud de probabilidad* de aparición de un fotón al tiempo t , en el punto $\mathbf{r}$, es proporcional a $|E(\mathbf{r}, t)|^2$.

COMENTARIOS:

- (i) Ya que las ecuaciones de Maxwell son lineales y homogéneas, se puede usar el *principio de superposición*: si E_1 y E_2 son dos soluciones de esas ecuaciones, entonces $E = \lambda_1 E_1 + \lambda_2 E_2$, donde λ_1 y λ_2 son constantes, es también una solución. Este principio de superposición explica los fenómenos ondulatorios en la óptica clásica (interferencia, difracción). Sin embargo, en física cuántica, la interpretación de $E(\mathbf{r}, t)$ como una amplitud de probabilidad es esencial.
- (ii) La teoría solo permite calcular la probabilidad de ocurrencia de un evento dado. Verificaciones experimentales deben constatar mediante un gran número de experimentos idénticos.
- (iii) Se considera “el estado de un fotón” en analogía con $E(\mathbf{r}, t)$ y la función de onda $\psi(\mathbf{r}, t)$ que caracteriza el estado cuántico de una partícula material. Esta analogía óptica permite entender, sin recurrir a cálculos, varias propiedades cuánticas. Por ello resulta válido considerar que $E(\mathbf{r}, t)$ caracteriza el estado cuántico de un fotón.
- (iv) El hecho de que $\psi(\mathbf{r}, t)$ se tome complejo es esencial en mecánica cuántica, mientras que la notación compleja de $E(\mathbf{r}, t)$ usada en óptica se hace por conveniencia (solo la parte real tiene significado físico).

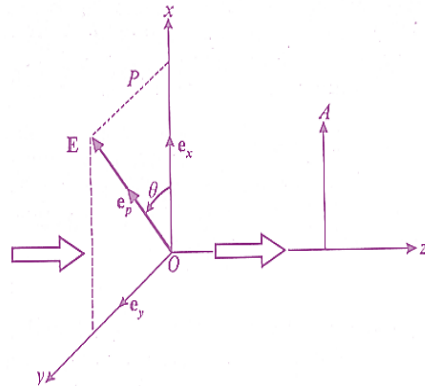
5.3 El principio de la descomposición espectral

El experimento consiste en dirigir una onda plana de luz polarizada a un *analizador A*. Oz designa la dirección de propagación de esta onda y $\mathbf{e}_p$, el vector unitario describe su polarización. El analizador A transmite la luz polarizada paralela a Ox y absorbe la luz polarizada paralela a Oy .

La descripción clásica de este experimento (una descripción que es válida para un rayo de luz suficientemente intenso) es la siguiente. La onda plana polarizada se caracteriza por un campo eléctrico de la forma:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E_0 \mathbf{e}_p e^{i(kz - \omega t)} \quad [5.3.1]$$

donde E_0 es una constante. La intensidad de la luz I es proporcional a $|E_0|^2$. Después de que pasa por el analizador, la onda plana está polarizada a lo largo de Ox : $\mathbf{E}'(\mathbf{r}, t) = E_0' \mathbf{e}_x e^{i(kz - \omega t)}$ [5.3.2]



Su intensidad I' es proporcional a $|E_0'|^2$, y está dada por la *ley de Malus*:

$$I' = I \cos^2 \theta \quad [5.3.3]$$

Donde θ es el ángulo entre $\mathbf{e}_x$ y $\mathbf{e}_p$.

Lo que ocurre a nivel cuántico, cuando I es suficientemente débil como para que los fotones alcancen el detector de uno en uno, es que el detector nunca registra “la fracción de un fotón”.

Los fotones cruzan el analizador o son absorbidos por este, pero no puede predecirse cuando ocurrirá una u otra situación. Solo se pueden conocer las probabilidades correspondientes. Si se envía un número N grande de fotones uno tras de otro, el resultado corresponde a la *ley clásica*; es decir, se detectarán $N \cos^2\theta$ en el analizador.

De esta descripción se obtienen las siguientes ideas:

- (i) El dispositivo de medición puede dar solamente ciertos resultados privilegiados, que pueden ser llamados **resultados propios** (*eigen-resultados*). Se puede decir que hay una cuantización de los resultados, en contraste con el caso clásico en el que la intensidad transmitida I' puede variar de manera continua, de acuerdo con el valor de θ , entre 0 e I .
- (ii) Para cada uno de estos *resultados propios* corresponde un **estado propio** (*eigen-estado*). Aquí, los dos *estados propios* están caracterizados por:

$$\mathbf{e}_p = \mathbf{e}_x \quad [5.3.4]$$

ó

$$\mathbf{e}_p = \mathbf{e}_y$$

Si $\mathbf{e}_p = \mathbf{e}_x$, se sabe con certeza que el fotón atravesó el analizador; si $\mathbf{e}_p = \mathbf{e}_y$, fue detenido definitivamente. El principio de correspondencia entre los resultados y los estados propios es entonces el siguiente: Si la partícula está, antes de la medición, en uno de los *estados propios*, el resultado de la medición es verás: solo puede estar asociado a un resultado propio.

- (iii) Cuando un estado antes de la medición es arbitrario, solo pueden predecirse las probabilidades de obtener diferentes resultados propios. Para encontrar esas probabilidades se puede descomponer el estado de las partículas en una combinación lineal de varios *estados propios*. Por ejemplo, para un estado arbitrario $\mathbf{e}_p$, se puede escribir:

$$\mathbf{e}_p = \mathbf{e}_x \cos\theta + \mathbf{e}_y \sin\theta \quad [5.3.5]$$

La probabilidad de obtención de un **resultado propio** es proporcional al cuadrado del valor absoluto del coeficiente del **estado propio** correspondiente. El factor de proporcionalidad está determinado por la condición de que la suma de todas esas probabilidades debe ser igual a 1. Entonces, se deduce de la ecuación anterior que cada fotón tiene la probabilidad $\cos^2\theta$ de atravesar el analizador y la probabilidad $\sin^2\theta$ de ser absorbido por este ($\cos^2\theta + \sin^2\theta = 1$). Esta regla, en mecánica cuántica, se llama **principio de la descomposición espectral**; y depende del tipo de dispositivo de medición considerado.

- (iv) Después de pasar por el analizador, la luz es completamente polarizada a lo largo de $\mathbf{e}_x$.

6. Formalismo de la mecánica cuántica

Las funciones de onda pertenecen al “*espacio vectorial F de funciones de onda*”. Los estados de un sistema son “*vectores de estado*” en “*el espacio de estados E* ”.

6.1 Espacio de funciones de onda de una partícula.

Interpretación probabilística de la función de onda $\psi(\mathbf{r}, t)$ de una partícula: $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$ representa la probabilidad de encontrar, al tiempo t , la partícula en el volumen $d^3r = dx dy dz$ cerca del punto $\mathbf{r}$. La probabilidad de hallar la partícula en cualquier parte del espacio es igual a 1, así se tiene que:

$$\int d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \equiv 1 \quad [6.1.1]$$

Donde la integración se extiende a todo el espacio. Esta integral converge y pertenece al conjunto L^2 de las funciones cuadrado-integrables, del espacio de Hilbert.

Solo se consideran funciones $\psi(\mathbf{r}, t)$ bien definidas, que sean continuas, infinitamente diferenciables (por ejemplo, un estado cuya función sea discontinua en un punto dado del espacio no tendrá significado físico, ya que ningún experimento permite tener acceso a fenómenos reales en una escala muy pequeña, digamos 10^{-30} m). Es posible confinar las funciones de onda a ciertos dominios (lo que permite localizar a una partícula en una región finita del espacio; por ejemplo, en el laboratorio). Bastará con decir que F es un subconjunto de funciones de onda compuesto por funciones suficientemente regulares de L^2 .

ESTRUCTURA DEL ESPACIO F DE FUNCIONES DE ONDA

Es fácil demostrar que F satisface todos los criterios de un espacio vectorial. Como ejemplo, se demuestra que si $\psi_1(\mathbf{r})$ y $\psi_2(\mathbf{r}) \in F$, entonces:

$$\psi(\mathbf{r}) = \lambda_1 \psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2 \psi_2(\mathbf{r}) \in F \quad [6.1.2]$$

Donde λ_1 y λ_2 son dos números complejos arbitrarios.

Para mostrar que $\psi(\mathbf{r})$ es cuadrado-integrable, se hace la expansión de $|\psi(\mathbf{r})|^2$:

$$|\psi(\mathbf{r})|^2 = |\lambda_1|^2 |\psi_1(\mathbf{r})|^2 + |\lambda_2|^2 |\psi_2(\mathbf{r})|^2 + \lambda_1^* \lambda_2 \psi_1^*(\mathbf{r}) \psi_2(\mathbf{r}) + \lambda_1 \lambda_2^* \psi_1(\mathbf{r}) \psi_2^*(\mathbf{r}) \quad [6.1.3]$$

Los últimos dos términos tienen el mismo módulo, que tiene un límite superior:

$$|\lambda_1| |\lambda_2| [|\psi_1(\mathbf{r})|^2 + |\psi_2(\mathbf{r})|^2]$$

$|\psi(\mathbf{r})|^2$ es más pequeño que la función cuya integral converge, ya que ψ_1 y ψ_2 son cuadrado-integrables.

EL PRODUCTO ESCALAR

Con cada par de elementos de F , $\phi(\mathbf{r})$ y $\psi(\mathbf{r})$, tomados en ese orden, se asocia el número complejo, denotado por (ϕ, ψ) , que, por definición, es igual a:

$$(\phi, \psi) \equiv \int d^3\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad [6.1.4]$$

(ϕ, ψ) es el *producto escalar* de $\psi(\mathbf{r})$ por $\phi(\mathbf{r})$ [esta integral siempre converge si ϕ y ψ pertenecen a F].

PROPIEDADES:

$$\begin{aligned} (\phi, \psi) &= (\psi, \phi)^* \\ (\phi, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) &= \lambda_1(\phi, \psi_1) + \lambda_2(\phi, \psi_2) \\ (\lambda_1\phi_1 + \lambda_2\phi_2, \psi) &= \lambda_1^*(\phi_1, \psi) + \lambda_2^*(\phi_2, \psi) \end{aligned} \quad [6.1.5]$$

El producto escalar es *lineal* con respecto a la segunda función par, y *antilineal* con respecto de la primera. Si $(\phi, \psi) = 0$, $\phi(\mathbf{r})$ y $\psi(\mathbf{r})$ se dice que son *ortogonales*.

$$(\psi, \psi) \equiv \int d^3\mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2 \quad [6.1.6]$$

Es un número real positivo, y es cero $\Leftrightarrow \psi(\mathbf{r}) \equiv 0$.

La $\sqrt{(\psi, \psi)}$ se llama norma de $\psi(\mathbf{r})$ [puede verificarse fácilmente que este número tiene todas las propiedades de una norma]. El producto escalar, tal como se ha elegido permite hacer la definición de la norma en F .

DESIGUALDAD DE SCHWARTZ:

$$|(\psi_1, \psi_2)| \leq \sqrt{(\psi_1, \psi_1)} \sqrt{(\psi_2, \psi_2)} \quad [6.1.7]$$

OPERADORES LINEALES

Un operador lineal A es, por definición, una entidad matemática que asocia a cada función $\psi(\mathbf{r}) \in F$ otra función $\psi'(\mathbf{r})$; la correspondencia es lineal si:

$$\begin{aligned} \psi'(\mathbf{r}) &= A\psi(\mathbf{r}) \\ A[\lambda_1\psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2\psi_2(\mathbf{r})] &= \lambda_1 A\psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2 A\psi_2(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad [6.1.8]$$

Como ejemplo se pueden citar los siguientes operadores: el operador de paridad Π , cuya definición es la siguiente:

$$\Pi\psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z) \quad [6.1.9]$$

El operador que realiza la multiplicación por x , llamado X , y cuya definición es:

$$X\psi(x, y, z) = x\psi(x, y, z) \quad [6.1.10]$$

Y el operador que deriva con respecto a x , conocido como D_x , y cuya definición es:

$$D_x\psi(x, y, z) = \frac{\partial\psi(x, y, z)}{\partial x} \quad [6.1.11]$$

[Los dos operadores X y D_x , actuando sobre una función $\psi(\mathbf{r}) \in F$, pueden transformar una función que no sea cuadrado-integrable necesariamente].

PRODUCTO DE OPERADORES: Sean A y B dos operadores lineales. El producto AB esta dado por:

$$(AB)\psi(\mathbf{r}) = A[B\psi(\mathbf{r})] \quad [6.1.12]$$

B primero puede actuar sobre $\psi(\mathbf{r})$, lo cual da $\phi(\mathbf{r}) = B\psi(\mathbf{r})$, luego A opera sobre la nueva función $\phi(\mathbf{r})$.

En general, $AB \neq BA$. Se llama *conmutador* de A y B al operador que se escribe $[A, B]$ y que se define por:

$$[A, B] \equiv AB - BA \quad [6.1.13]$$

Ejemplo: se calcula el conmutador de $[X, D_x]$, para ello se toma una función arbitraria $\psi(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} [X, D_x]\psi(\mathbf{r}) &= \left(x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} x \right) \psi(\mathbf{r}) \\ &= x \frac{\partial}{\partial x} \psi(\mathbf{r}) - \frac{\partial}{\partial x} [x\psi(\mathbf{r})] \\ &= x \frac{\partial}{\partial x} \psi(\mathbf{r}) - \psi(\mathbf{r}) - x \frac{\partial}{\partial x} \psi(\mathbf{r}) = -\psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad [6.1.14]$$

Como esto es cierto para toda función $\psi(\mathbf{r})$, se deduce que:

$$[X, D_x] = -1 \quad \blacksquare \quad [6.1.15]$$

BASES ORTONORMALES DISCRETAS EN F

Considérese un conjunto numerable de funciones de F , etiquetadas por un índice discreto i , ($i = 1, 2, \dots, n, \dots$):

$$u_1(\mathbf{r}) \in F, u_2(\mathbf{r}) \in F, \dots, u_i(\mathbf{r}) \in F, \dots$$

El conjunto $\{u_i(\mathbf{r})\}$ es *ortonormal* si:

$$(u_i, u_j) \equiv \int d^3r u_i^*(\mathbf{r}) u_j(\mathbf{r}) \equiv \delta_{ij} \quad [6.1.16]$$

Donde δ_{ij} , es la función delta de Kronecker, y es igual a 1 para $i = j$ y a cero si $i \neq j$.

Este conjunto es una *base* (es decir, es un conjunto completo de funciones que genera el espacio) si cada función $\psi(\mathbf{r}) \in F$ puede expandirse de una sola manera en términos de $u_i(\mathbf{r})$:

$$\psi(\mathbf{r}) \equiv \sum_i c_i u_i(\mathbf{r}) \quad [6.1.17]$$

LA FUNCIÓN DE ONDA EN LA BASE $\{u_i(\mathbf{r})\}$:

Multiplicando ambos lados de la ecuación [6.1.17] por $u_j^*(\mathbf{r})$ e integrando sobre todo el espacio, de [6.1.6] y [6.1.16]:

$$(u_j, \psi) = \left(u_j, \sum_i c_i u_i \right) = \sum_i c_i (u_j, u_i) = \sum_i c_i \delta_{ij} = c_j \quad [6.1.8]$$

Esto es:

$$c_i = (u_i, \psi) = \int d^3r u_i^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad [6.1.19]$$

Las componentes de c_i de $\psi(\mathbf{r})$ en $u_i(\mathbf{r})$ son entonces iguales al producto escalar de $\psi(\mathbf{r})$ por $u_i(\mathbf{r})$. Una vez que la base $\{u_i(\mathbf{r})\}$ ha sido elegida es equivalente especificar $\psi(\mathbf{r})$ o sus componentes c_i con respecto a las funciones base. Se dice que el conjunto de números c_i representa a la función $\psi(\mathbf{r})$ en la base $\{u_i(\mathbf{r})\}$.

COMENTARIOS:

- (i) Nótese la analogía con la base ortonormal $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ del espacio ordinario tridimensional, $\mathbf{R}^3$. De hecho, $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ y $\mathbf{e}_3$ son ortogonales y unitarios; y pueden ser expresados por:

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad [6.1.20]$$

Cualquier vector $\mathbf{v}$ de $\mathbf{R}^3$ puede expresarse en esta base:

$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^3 v_i \mathbf{e}_i \quad [6.1.21]$$

Con:

$$v_i = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{v} \quad [6.1.22]$$

La diferencia es que los números v_i son reales mientras que los c_i de la exposición anterior son complejos.

- (ii) La misma función $\psi(\mathbf{r})$ obviamente tiene componentes diferentes en dos bases diferentes. Más tarde se estudia el problema de cambio de base.
- (iii) También se puede representar, en la base $\{\mathbf{u}_i(\mathbf{r})\}$, un operador lineal A con un conjunto de números que pueden ser arreglados en forma de matriz (esto se hace más fácilmente con la notación de Dirac).

PRODUCTO ESCALAR EN TÉRMINOS DE COMPONENTES:

Sean $\phi(\mathbf{r})$ y $\psi(\mathbf{r})$ dos funciones de onda que pueden expandirse como sigue:

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}) &= \sum_i b_i u_i(\mathbf{r}) \\ \psi(\mathbf{r}) &= \sum_j c_j u_j(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad [6.1.23]$$

Su producto escalar se calcula como sigue:

$$(\phi, \psi) = \left(\sum_i b_i u_i, \sum_j c_j u_j \right) = \sum_{i,j} b_i^* c_j (u_i, u_j) = \sum_{i,j} b_i^* c_j \delta_{ij}$$

Esto es:

$$(\phi, \psi) \equiv \sum_i b_i^* c_i \quad [6.1.24]$$

En particular:

$$(\psi, \psi) \equiv \sum_i |c_i|^2 \quad [6.1.25]$$

El producto escalar de dos funciones de onda (o el cuadrado de la norma de la función de onda) puede ser expresada simplemente en términos de las componentes en la base $\{\mathbf{u}_i(\mathbf{r})\}$.

COMENTARIO:

Sean $\mathbf{v}$ y $\mathbf{w}$ dos vectores de $\mathbf{R}^3$, con componentes v_i y w_j . La expresión analítica para el producto escalar es bien conocida:

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{w} = \sum_{i=1}^3 v_i w_i \quad [6.1.26]$$

La fórmula [6.1.25] puede considerarse una generalización de esta última.

RELACIÓN DE CERRADURA:

La relación [6.1.16], llamada relación de ortonormalización, expresa el hecho de que las funciones del conjunto $\{u_i(\mathbf{r})\}$ están normalizadas a 1 y son ortogonales entre sí. La relación de cerradura expresa el hecho de que el conjunto constituye una base.

Si $\{u_i(\mathbf{r})\}$ es una base de F , entonces existe una expansión como [6.1.17] para cada función $\psi(\mathbf{r}) \in F$. Sustituyendo [6.1.17] en la expresión [6.1.19] para las componentes c_i se tiene:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i u_i(\mathbf{r}) = \sum_i (u_i, \psi) u_i(\mathbf{r}) = \sum_i \left[\int d^3r' u_i^*(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \right] u_i(\mathbf{r}) \quad [6.1.27]$$

Nota: la variable de integración debe cambiar ya que $\mathbf{r}$ aparece en [6.1.17].

Intercambiando $\sum_i$ y la $\int d^3r'$, se obtiene:

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3r' \psi(\mathbf{r}') \left[\sum_i u_i(\mathbf{r}) u_i^*(\mathbf{r}') \right] \quad [6.1.28]$$

$\sum_i u_i(\mathbf{r}) u_i^*(\mathbf{r}')$ es una función $F(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$; de modo que para cualquier función $\psi(\mathbf{r})$ se tiene:

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3r' \psi(\mathbf{r}') F(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad [6.1.29]$$

Esta función es característica de la función $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Entonces se deduce que:

$$\boxed{\sum_i u_i(\mathbf{r}) u_i^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad [6.1.30]$$

Recíprocamente, si un conjunto ortonormal $\{u_i(\mathbf{r})\}$ satisface la relación de cerradura, constituye una base. Cualquier función $\psi(\mathbf{r})$ puede, entonces, escribirse como:

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3r' \psi(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad [6.1.31]$$

Sustituyendo la expresión [6.1.30] por $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ en esta expresión, se obtiene la fórmula [6.1.28], para la función $\psi(\mathbf{r})$. Para regresar a [6.1.27], se debe intercambiar nuevamente la sumatoria y la integral. Esta expresión expresa el hecho de que $\psi(\mathbf{r})$ siempre puede expandirse en términos de $u_i(\mathbf{r})$ y de los coeficientes de la expansión.

6.2 Espacio de estados. Notación de Dirac

Ya que el estado cuántico de una partícula es definido en un instante dado, por una función de onda $\psi(\mathbf{r})$. La interpretación de esta función requiere que sea cuadrado-integrable, y su expresión depende de la base elegida para su representación (de la misma manera que las coordenadas de un punto $\in \mathbf{R}^3$ dependerán de la elección del sistema coordenado usado).

Los estados cuánticos de una partícula se caracterizan por *vectores de estado*, en un espacio abstracto, E_r , llamado *espacio de estados* de la partícula. El hecho de que F sea un subconjunto de L^2 (*funciones cuadrado-integrables*), significa que E_r es un subespacio de Hilbert. A continuación, se va a definir la notación y las reglas del cálculo de vectores en E_r .

VECTORES “KET” Y “BRA”

Cualquier elemento, o vector, del espacio E es llamado vector ket, o, simplemente ket. Y se representa por el símbolo $|\rangle$, adentro del cual se ubica un signo distintivo que permite distinguirlo de los otros. Por ejemplo: $|\psi\rangle$.

Se asocia a cada función cuadrado-integrable $\psi(\mathbf{r})$ el vector de E , $|\psi\rangle$:

$$\psi(\mathbf{r}) \in F \Leftrightarrow |\psi\rangle \in E_r \quad [6.2.1]$$

A continuación, se traspasan las diferentes operaciones que se han introducido para F a E_r . Ya que F y E_r son isomórficos es necesario tener cuidado de distinguirlos bien para evitar confusiones. Nótese que la dependencia en $\mathbf{r}$ ya no aparece en $|\psi\rangle$; solo aparece la letra ψ para recordarnos a que función está asociada. $\psi(\mathbf{r})$ debe interpretarse como el conjunto de componentes del ket $|\psi\rangle$ en una base particular, $\mathbf{r}$ juega el papel de un índice. Consecuentemente, el procedimiento consiste en caracterizar inicialmente un vector por sus componentes en un sistema coordenado privilegiado.

Se designa E_x al espacio de estados (sin espín) de una partícula en una dimensión.

PRODUCTO ESCALAR:

Con cada par de kets $|\phi\rangle$ y $|\psi\rangle$, tomados en ese orden, se asocia el número complejo, que corresponde al producto escalar, $(|\phi\rangle, |\psi\rangle)$, y que satisface las propiedades descritas en las ecuaciones [6.1.5-7]. Posteriormente se rescribirán estas en la notación de Dirac, después de introducir el concepto de “bra”.

En E_r el producto escalar de dos kets coincide con el producto escalar definido anteriormente para las funciones de onda correspondientes.

ELEMENTOS DEL ESPACIO DUAL E^* DE E : BRAS:

Se considera la definición de *funcional lineal* definida para los kets $|\psi\rangle$ de E . Una funcional lineal χ es una operación lineal que asocia un número complejo a cada $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle \in E \xrightarrow{\chi} \text{número } \chi(|\psi\rangle)$$
$$\chi(\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) \equiv \lambda_1 \chi(|\psi_1\rangle) + \lambda_2 \chi(|\psi_2\rangle) \quad [6.2.2]$$

(No deben confundirse la funcional lineal y el operador lineal. En ambos casos, uno está realizando las operaciones lineales, los primeros asocian a los kets números complejos, mientras que los segundos les asocian otros kets).

Se puede demostrar que un conjunto de funcionales lineales definidos en los kets $|\psi\rangle \in E$ constituyen vectores del espacio llamado *espacio dual* de E que se simboliza por E^* .

NOTACIÓN BRA PARA LOS VECTORES DE E^* :

Cualquier elemento, o vector, del espacio E^* es llamado *vector bra*, o simplemente bra. Estos se simbolizan con $\langle |$. Por ejemplo, el bra $\langle \chi|$ designa una funcional lineal χ y se usa la notación $\langle \chi|\psi\rangle$ para denotar el *número* obtenido aplicando la funcional lineal $\langle \chi| \in E^*$ sobre el ket $|\psi\rangle \in E$:

$$\chi(|\psi\rangle) \equiv \langle \chi|\psi\rangle \quad [6.2.3]$$

El origen de esta terminología es la palabra “braket”, usada para denotar el símbolo $\langle | \rangle$

CORRESPONDENCIA ENTRE KETS Y BRAS:

La existencia del producto escalar en E permite realizar la asociación de un ket $|\phi\rangle \in E$, a todo elemento de E^* , esto es, un bra que se denota $\langle \phi|$.

El ket $|\phi\rangle$ permite definir una funcional lineal: con cada ket $|\psi\rangle \in E$, se asocia un número complejo que es igual al producto escalar $(|\phi\rangle, |\psi\rangle)$ de $|\psi\rangle$ y $|\phi\rangle$. Sea $\langle \phi|$ esta funcional lineal; entonces se define la relación:

$$\langle \phi|\psi\rangle \equiv (|\phi\rangle, |\psi\rangle) \quad [6.2.4]$$

La correspondencia es antilineal

En el espacio E , el producto escalar es antilineal con respecto al primer vector. En la notación [6.2.4], esto se expresa como:

$$\begin{aligned}
 (\lambda_1 |\varphi_1\rangle + \lambda_2 |\varphi_2\rangle, |\psi\rangle) &= \lambda_1^* (|\varphi_1\rangle, |\psi\rangle) + \lambda_2^* (|\varphi_2\rangle, |\psi\rangle) \\
 &= \lambda_1^* \langle \varphi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \varphi_2 | \psi \rangle \\
 &= (\lambda_1^* \langle \varphi_1 | + \lambda_2^* \langle \varphi_2 |) |\psi\rangle
 \end{aligned}
 \tag{6.2.5}$$

De aquí que el bra asociado con el ket $\lambda_1 |\varphi_1\rangle + \lambda_2 |\varphi_2\rangle$ es el bra $\lambda_1^* \langle \varphi_1 | + \lambda_2^* \langle \varphi_2 |$:

$$\lambda_1 |\varphi_1\rangle + \lambda_2 |\varphi_2\rangle \Rightarrow \lambda_1^* \langle \varphi_1 | + \lambda_2^* \langle \varphi_2 |
 \tag{6.2.6}$$

Entonces la correspondencia entre uno y otro es antilineal.

COMENTARIO:

Si λ es un número complejo, y $|\psi\rangle$ es un ket, $\lambda|\psi\rangle$ es un ket (E es un espacio vectorial). Algunas veces se puede escribir $|\lambda\psi\rangle$:

$$|\lambda\psi\rangle \equiv \lambda|\psi\rangle
 \tag{6.2.7}$$

Debe tenerse cuidado de recordar que $\langle \lambda\psi |$ representa el bra asociado con el ket $|\lambda\psi\rangle$. Ya que la correspondencia entre los bras y los kets es antilineal, se tiene que:

$$\langle \lambda\psi | \equiv \lambda^* \langle \psi |
 \tag{6.2.8}$$

NOTACIÓN DE DIRAC PARA EL PRODUCTO ESCALAR:

Se tienen dos notaciones para el producto escalar de $|\psi\rangle$ por $|\varphi\rangle$: $(|\varphi\rangle, |\psi\rangle)$ o $\langle \varphi | \psi \rangle$, siendo $\langle \varphi |$ el bra asociado al ket $|\varphi\rangle$.

Se utilizará únicamente la notación de Dirac: $\langle \varphi | \psi \rangle$.

La siguiente tabla, resume en la notación de Dirac, las propiedades del producto escalar:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^*
 \tag{6.2.9}$$

$$\langle \varphi | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \varphi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \varphi | \psi_2 \rangle
 \tag{6.2.10}$$

$$\langle \lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2 | \psi \rangle = \lambda_1^* \langle \varphi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \varphi_2 | \psi \rangle
 \tag{6.2.11}$$

$$\langle \psi | \psi \rangle \text{ es un real positivo; y solo es cero si } |\psi\rangle = 0
 \tag{6.2.12}$$

¿EXISTE UN KET CORRESPONDIENTE A CADA BRA?

Aunque para todo ket existe un bra, es posible encontrar un bra para el cual no existe un ket. Esta dificultad no daña a la mecánica cuántica.

Nota: se omiten los ejemplos por ser muy complicados y poco útiles.

OPERADORES LINEALES

Un operador lineal A asocia a cualquier ket $|\psi\rangle \in E$ otro ket $|\psi'\rangle \in E$, mediante la correspondencia es lineal:

$$|\psi'\rangle = A |\psi\rangle \quad [6.2.13]$$

$$A(\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) = \lambda_1 A |\psi_1\rangle + \lambda_2 A |\psi_2\rangle \quad [6.2.14]$$

El producto de dos operadores lineales A y B , escrito AB , se define de la siguiente manera:

$$(AB) |\psi\rangle = A(B |\psi\rangle) \quad [6.2.15]$$

B actúa primero sobre $|\psi\rangle$ para dar $B|\psi\rangle$; A actúa sobre el ket $B|\psi\rangle$. En general, $AB \neq BA$. El conmutador $[A, B]$ de A y B es, por definición:

$$[A, B] = AB - BA \quad [6.2.16]$$

Sean $|\phi\rangle$ y $|\psi\rangle$ dos kets. Se puede llamar el *elemento de la matriz* de A entre $|\phi\rangle$ y $|\psi\rangle$, al producto escalar:

$$\langle \phi | (A |\psi\rangle) \quad [6.2.17]$$

Este resulta un *número* que depende linealmente de $|\psi\rangle$ y de manera antilineal de $|\phi\rangle$.

EJEMPLOS DE OPERADORES LINEALES: PROYECTORES:

Por ejemplo, $\langle \phi |$ denota una funcional lineal (un bra), y $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$, el producto escalar de dos kets $|\psi_1\rangle$ y $|\psi_2\rangle$. El número asociado con la funcional $\langle \phi |$ con un ket arbitrario $|\psi\rangle$ se escribe simplemente yuxtaponiendo los símbolos $\langle \phi |$ y $|\psi\rangle$: $\langle \phi | \psi \rangle$. Esto es el producto escalar de $|\psi\rangle$ por $|\phi\rangle$ correspondiendo a $\langle \phi |$.

Ahora bien, si se escriben en orden opuesto:

$$|\psi\rangle \langle \phi | \quad [6.2.18]$$

Esta expresión representa un operador.

Eligiendo un ket arbitrario $|\chi\rangle$ y considerando:

$$|\psi\rangle \langle \phi|\chi\rangle \quad [6.2.19]$$

Se tiene que $\langle \phi|\chi\rangle$ es un número complejo; consecuentemente, [6.2.19] es un ket, obtenido al multiplicar $|\psi\rangle$ por un escalar $\langle \phi|\chi\rangle$. $|\psi\rangle \langle \phi|$, aplicado a un ket arbitrario, da otro ket: es un operador.

El orden de los símbolos es de suma importancia. Solo los números complejos pueden moverse sin cambios, debido a la linealidad del espacio E y de los operadores en uso. Así que si λ es un número:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle \lambda &= \lambda |\psi\rangle \\ \langle \psi| \lambda &= \lambda \langle \psi| \\ A\lambda |\psi\rangle &= \lambda A |\psi\rangle \text{ (donde } A \text{ es un operador lineal)} \\ \langle \phi| \lambda |\psi\rangle &= \lambda \langle \phi|\psi\rangle = \langle \phi|\psi\rangle \lambda \end{aligned} \quad [6.2.20]$$

Pero, para los operadores bras y kets, el orden debe ser respetado cuidadosamente.

EL PROYECTOR P_ψ SOBRE UN KET $|\psi\rangle$:

Sea $|\psi\rangle$ un ket normalizado a 1:

$$\langle \psi|\psi\rangle = 1 \quad [6.2.21]$$

Considérese el operador P_ψ definido por:

$$P_\psi = |\psi\rangle \langle \psi| \quad [6.2.22]$$

Entonces, aplicado a un ket arbitrario $|\phi\rangle$:

$$P_\psi |\phi\rangle = |\psi\rangle \langle \psi|\phi\rangle \quad [6.2.23]$$

P_ψ , actuando sobre el ket arbitrario $|\phi\rangle$, da un ket proporcional a $|\psi\rangle$. El coeficiente de proporcionalidad $\langle \psi|\phi\rangle$ es el producto escalar de $|\phi\rangle$ por $|\psi\rangle$. El significado “geométrico” de P_ψ es claro: es el operador de “proyección ortogonal” sobre el ket $|\psi\rangle$.

Esta interpretación se confirma por el hecho de que $P_\psi^2 = P_\psi$ (proyectar dos veces es lo mismo que hacerlo solo una vez). Para ver esto, se puede escribir:

$$P_\psi^2 = P_\psi P_\psi = |\psi\rangle \langle \psi|\psi\rangle \langle \psi| \quad [6.2.24]$$

En esta expresión, $\langle \psi|\psi\rangle$ es un número, que es igual a 1; entonces:

$$P_\psi^2 = |\psi\rangle \langle \psi| = P_\psi \quad [6.2.25]$$

PROYECTOR EN UN SUBESPACIO:

Sean $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, |\varphi_n\rangle$, n vectores normalizados que son ortogonales entre sí:

$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}; \quad i, j = 1, 2, \dots, n \quad [6.2.26]$$

Se denota con E_n al subespacio de E expandido por esos n vectores. Sea P_n un operador lineal definido por:

$$P_n = \sum_{i=1}^n |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| \quad [6.2.27]$$

Calculando P_n^2 :

$$P_n^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle \langle \varphi_j| \quad [6.2.28]$$

Y usando [6.2.26]:

$$P_n^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |\varphi_i\rangle \langle \varphi_j| \delta_{ij} = \sum_{i=1}^n |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| = P_n \quad [6.2.29]$$

P_n es un proyector. Así que P_n proyecta en el espacio E_n , ya que para cualquier $|\psi\rangle \in E$:

$$P_n |\psi\rangle = \sum_{i=1}^n |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i | \psi \rangle \quad [6.2.30]$$

P_n actuando sobre $|\psi\rangle$ da una superposición de proyecciones de $|\psi\rangle$ en varios $|\varphi_i\rangle$, esto es, la proyección de $|\psi\rangle$ en el espacio E_n .

CONJUGACIÓN HERMITIANA

Un operador también puede actuar sobre un bra. Sea $\langle \varphi|$ un bra bien definido, y considérese el conjunto de todos los kets $|\psi\rangle$. Con cada uno de esos kets puede asociarse el número complejo $\langle \varphi| (A |\psi\rangle)$, definido sobre los elementos de la matriz A entre $|\varphi\rangle$ y $|\psi\rangle$.

Ya que A es lineal y el producto escalar tiene una dependencia lineal sobre el ket, el número $\langle \varphi| (A |\psi\rangle)$ depende linealmente de $|\psi\rangle$.

La relación que define $\langle \varphi|A$ puede escribirse como:

$\langle \varphi| A |\psi\rangle = \langle \varphi| (A |\psi\rangle)$

[6.2.31]

El operador A asocia con cada bra $\langle \phi|$ un nuevo bra $\langle \phi|A$. Para mostrar que la correspondencia es lineal, considérese una combinación lineal de los bras $\langle \phi_1|$ y $\langle \phi_2|$:

$$\langle \chi| = \lambda_1 \langle \phi_1| + \lambda_2 \langle \phi_2| \quad [6.2.32]$$

(que significa que $\langle \chi|\psi\rangle = \lambda_1 \langle \phi_1|\psi\rangle + \lambda_2 \langle \phi_2|\psi\rangle$). De [6.2.31] se tiene que:

$$\begin{aligned} \langle \chi|A|\psi\rangle &= \langle \chi|(A|\psi\rangle) = \lambda_1 \langle \phi_1|(A|\psi\rangle) + \lambda_2 \langle \phi_2|(A|\psi\rangle) \\ &= \lambda_1 \langle \phi_1|A|\psi\rangle + \lambda_2 \langle \phi_2|A|\psi\rangle \end{aligned} \quad [6.2.33]$$

Ya que $|\psi\rangle$ es arbitrario, se sigue que:

$$\begin{aligned} \langle \chi|A &= (\lambda_1 \langle \phi_1| + \lambda_2 \langle \phi_2|)A \\ &= \lambda_1 \langle \phi_1|A + \lambda_2 \langle \phi_2|A \end{aligned} \quad [6.2.34]$$

El operador [6.2.31] define un operador lineal sobre los bras. El bra $\langle \phi|A$ es el bra que resulta de la acción del operador lineal A sobre $\langle \phi|$.

COMENTARIOS:

- (i) De la definición [6.2.31] de $\langle \phi|A$, se ve que el paréntesis en el símbolo que define al elemento de la matriz A entre $|\phi\rangle$ y $|\psi\rangle$ no tiene importancia. Entonces, se puede designar a este elemento de la matriz con la notación: $\langle \phi|A|\psi\rangle$:

$$\langle \phi|A|\psi\rangle = (\langle \phi|A)|\psi\rangle = \langle \phi|(A|\psi\rangle) \quad [6.2.35]$$

- (ii) El orden relativo entre $\langle \phi|$ y A es muy importante en la notación $\langle \phi|A$. Se debe escribir $\langle \phi|A$ y no $A\langle \phi|$: $\langle \phi|A$ al actuar sobre el ket $|\psi\rangle$ da el número $\langle \phi|A|\psi\rangle$; $\langle \phi|A$ es entonces un bra. Por otro lado, $A\langle \phi|$, actuando sobre el ket $|\psi\rangle$, dará $A\langle \phi|\psi\rangle$, esto es, un operador (el operador A multiplica al número $\langle \phi|\psi\rangle$; y como no se ha definido ningún objeto matemático en este sentido, entonces $A\langle \phi|$ carece de sentido.

EL OPERADOR ADJUNTO $A^\dagger$ DEL OPERADOR LINEAL A :

La correspondencia entre bras y kets permite asociar con cualquier operador lineal A otro operador $A^\dagger$, llamado el operador adjunto (o el hermitiano conjugado) de A .

Sea $|\psi\rangle$ un ket arbitrario de E . El operador A asociado con otro ket $|\psi'\rangle = A |\psi\rangle$ de E .

$$\begin{array}{ccc}
 & A & \\
 |\psi\rangle & \xrightarrow{\quad\quad\quad} & |\psi'\rangle = A |\psi\rangle \\
 \downarrow & & \downarrow \\
 \langle\psi| & \xrightarrow{\quad\quad\quad} & \langle\psi'| = \langle\psi| A^\dagger \\
 & A^\dagger &
 \end{array}$$

Al ket $|\psi\rangle$ le corresponde el bra $\langle\psi|$; de la misma manera, a $|\psi'\rangle$ le corresponde $\langle\psi'|$. Esta correspondencia entre kets y bras permite definir la acción del operador $A^\dagger$ sobre los bras: el operador $A^\dagger$ asociado con el $\langle\psi|$ corresponde al ket $|\psi\rangle$. El bra $\langle\psi'|$ corresponde al $|\psi'\rangle = A |\psi\rangle$. Entonces, $\langle\psi'| = \langle\psi| A^\dagger$.

La relación $\langle\psi'| = \langle\psi| A^\dagger$ es lineal. Se sabe que el bra $\lambda_1 \langle\psi_1| + \lambda_2 \langle\psi_2|$, corresponde al ket $\lambda_1^* |\psi_1\rangle + \lambda_2^* |\psi_2\rangle$ (la correspondencia entre bras y kets es antilineal). El operador A transforma $\lambda_1^* |\psi_1\rangle + \lambda_2^* |\psi_2\rangle$ en $\lambda_1^* A |\psi_1\rangle + \lambda_2^* A |\psi_2\rangle = \lambda_1^* |\psi'_1\rangle + \lambda_2^* |\psi'_2\rangle$. Finalmente, a este ket corresponde el bra:

$$\lambda_1 \langle\psi'_1| + \lambda_2 \langle\psi'_2| = \lambda_1 \langle\psi_1| A^\dagger + \lambda_2 \langle\psi_2| A^\dagger$$

De esto se concluye que:

$$(\lambda_1 \langle\psi_1| + \lambda_2 \langle\psi_2|) A^\dagger = \lambda_1 \langle\psi_1| A^\dagger + \lambda_2 \langle\psi_2| A^\dagger \quad [6.2.36]$$

Entonces, $A^\dagger$ es un operador lineal definido por la fórmula:

$$\boxed{|\psi'\rangle = A |\psi\rangle \Leftrightarrow \langle\psi'| = \langle\psi| A^\dagger} \quad [6.2.37]$$

De esta última resulta fácil deducir otra relación importante que satisface el operador $A^\dagger$. Usando las propiedades del producto escalar, siempre se puede escribir:

$$\langle\psi'|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi'\rangle^* \quad [6.2.38]$$

Donde $|\varphi\rangle$ es un ket arbitrario de E . Con la expresión [6.2.37] para $|\psi'\rangle$ y $\langle\psi'|$, se obtiene:

$$\boxed{\langle\psi| A^\dagger |\varphi\rangle = \langle\varphi| A |\psi\rangle^*} \quad [6.2.39]$$

Esta relación es válida para todos los kets $|\varphi\rangle$ y $|\psi\rangle$.

COMENTARIOS ACERCA DE LA NOTACIÓN:

Se ha comentado que la notación: $|\lambda\psi\rangle$ y $\langle\lambda\psi|$ se puede prestar a confusión. El mismo problema se tiene con las expresiones $|A\psi\rangle$ y $\langle A\psi|$, donde A es un operador lineal. $|A\psi\rangle$ es otra manera de designar al ket $A|\psi\rangle$:

$$|A\psi\rangle = A|\psi\rangle \quad [6.2.40]$$

$\langle A\psi|$ es el bra asociado con el ket $|A\psi\rangle$. Usando [6.5.10] y [6.5.7] se tiene que:

$$\langle A\psi| = \langle\psi| A^\dagger \quad [6.2.41]$$

Donde el operador lineal A se ha sacado del símbolo bra, y debe ser reemplazado por el operador adjunto $A^\dagger$ (y colocado a la derecha del bra).

CORRESPONDENCIA ENTRE UN OPERADOR Y SU ADJUNTO

Usando [6.2.37] ó [6.2.39], es fácil mostrar que:

$$(A^\dagger)^\dagger = A \quad [6.2.42]$$

$$(\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger; (\lambda \text{ es un número}) \quad [6.2.43]$$

$$(A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger \quad [6.2.44]$$

Ahora se calcula $(AB)^\dagger$. Para ello, se considera el ket $|\phi\rangle = AB|\psi\rangle$. Escrito en la forma $|\phi\rangle = A|\chi\rangle$, y haciendo $|\chi\rangle = B|\psi\rangle$. Entonces:

$$\langle\phi| = \langle\psi| (AB)^\dagger = \langle\chi| A^\dagger = \langle\psi| B^\dagger A^\dagger$$

Ya que $\langle\chi| = \langle\psi| B^\dagger$. De esto, se deduce que:

$$\boxed{(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger} \quad [6.2.45]$$

Nótese que el orden cambia cuando se toma el adjunto del producto de dos operadores.

COMENTARIO:

Ya que $(A^\dagger)^\dagger = A$, se puede escribir usando [6.2.41]:

$$\langle A^\dagger\phi| = \langle\phi| (A^\dagger)^\dagger = \langle\phi| A$$

Debido a que el lado izquierdo de [6.2.31] puede describirse en la forma $\langle A^\dagger \phi | \psi \rangle$. En la misma forma, el lado derecho de esta ecuación puede escribirse, con la notación de [6.2.40], en la forma $\langle \phi | A \psi \rangle$. De estos resultados se sigue la ecuación:

$$\langle A^\dagger \phi | \psi \rangle = \langle \phi | A \psi \rangle \quad [6.2.46]$$

CONJUGACIÓN HERMITIANA EN LA NOTACIÓN DE DIRAC:

Se dice que un ket $|\psi\rangle$ y su correspondiente bra $\langle \psi|$ son “conjugados hermitianos” entre sí, del mismo modo que $A^\dagger$ y A . La operación de la conjugación hermitiana cambia el orden de los objetos a los cuales es aplicada. Así, por ejemplo, $A|\psi\rangle$ viene a ser $\langle \psi|A^\dagger$. De la misma manera, se vio en [6.2.45] que el conjugado hermitiano de un producto de dos operadores es igual al producto de los conjugados hermitianos tomados en el orden opuesto. Así:

$$(|u\rangle \langle v|)^\dagger = |v\rangle \langle u| \quad [6.2.47]$$

Aplicando la relación [6.2.39] al operador $|u\rangle \langle v|$, se encuentra que:

$$\langle \psi | (|u\rangle \langle v|)^\dagger | \phi \rangle = [\langle \phi | (|u\rangle \langle v|) | \psi \rangle]^* \quad [6.2.48]$$

Ahora, si se usa la propiedad [6.2.39] del producto escalar:

$$\begin{aligned} [\langle \phi | (|u\rangle \langle v|) | \psi \rangle]^* &= \langle \phi | u \rangle^* \langle v | \psi \rangle^* = \langle \psi | v \rangle \langle u | \phi \rangle \\ &= \langle \psi | (|v\rangle \langle u|) | \phi \rangle \end{aligned} \quad [6.2.49]$$

Comparando [6.2.48] y [6.2.49], se puede derivar [6.2.47].

El resultado de la operación de la conjugación hermitiana sobre una constante es tal que simplemente transforma λ por λ^* (conjugación compleja), lo cual se puede ver de [6.2.6] y [6.2.43]. Esto está de acuerdo con el hecho de que $\langle \phi | \psi \rangle^* = \langle \psi | \phi \rangle$.

Entonces, el conjugado hermitiano de un ket es un bra, y viceversa; de un operador es su adjunto; y de un número es su complejo conjugado. En la notación de Dirac la conjugación hermitiana se realiza de manera muy simple; y es suficiente aplicar la siguiente regla:

REGLA: Para obtener el conjugado hermitiano (o el adjunto) de cualquier expresión compuesta de constantes, kets, bras y operadores, se debe:

Reemplazar	{	La constantes por sus complejos conjugados. Los kets por sus bras asociados. Los bras por sus kets asociados. Los operadores por sus adjuntos.
-------------------	---	---

–Invertir el orden de los factores (la posición de las constantes no tiene importancia).

Ejemplos:

1. $\langle u| A |v\rangle |w\rangle \langle \psi|$ es un operador (λ y $\langle u| A |v\rangle$ son números). El adjunto de este operador se obtiene usando la regla descrita anteriormente: $|\psi\rangle \langle w| \langle v| A^\dagger |u\rangle \lambda^*$, que también puede escribirse $\lambda^* \langle v| A^\dagger |u\rangle |\psi\rangle \langle w|$, cambiando la posición de los números λ^* y $\langle v| A^\dagger |u\rangle$.
2. De la misma manera, $\lambda |u\rangle \langle v|w\rangle$ es un ket (λ y $\langle v|w\rangle$ son constantes). El bra conjugado es $\langle w|v\rangle \langle u|\lambda^*$, que también puede escribirse $\lambda^* \langle w|v\rangle \langle u|$.

OPERADORES HERMITIANOS

Un operador A se dice que es hermitiano si es igual a su adjunto, esto es, si:

$$A = A^\dagger \quad [6.2.50]$$

Combinando B-60) y B-49), se tiene que un operador hermitiano satisface la relación:

$$\langle \psi| A |\phi\rangle = \langle \phi| A |\psi\rangle^* \quad [6.2.51]$$

Que es válida para todo $|\phi\rangle$ y $|\psi\rangle$.

Finalmente, para un operador hermitiano, [6.2.46], se tiene que:

$$\langle A\phi|\psi\rangle = \langle \phi|A\psi\rangle \quad [6.2.52]$$

Los operadores hermitianos juegan un papel fundamental en la mecánica cuántica, como se podrá corroborar más adelante.

Si la fórmula [6.2.47] se aplica al caso en que $|u\rangle = |v\rangle = |\psi\rangle$, se tiene que el proyector $P_\psi = |\psi\rangle \langle \psi|$: es hermitiano:

$$P_\psi^\dagger = |\psi\rangle \langle \psi| = P_\psi \quad [6.2.53]$$

COMENTARIO:

El producto de dos operadores hermitianos A y B es hermitiano solamente si $[A, B] = 0$. Si pues, $A = A^\dagger$ y $B = B^\dagger$, y puede mostrarse usando [6.2.45] que $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA$, lo cual es igual a $AB \Leftrightarrow [A, B] = 0$.

6.3 Representación en el espacio de estados

DEFINICIÓN DE REPRESENTACIÓN: Elegir una representación significa elegir una base ortonormal, ya sea discreta o continua, en el espacio E . Los vectores y los operadores se representan en estas bases por *números*: componentes de un vector, elementos de matriz para un operador. Los cálculos vectoriales de la sección B vienen a ser cálculos matriciales con estos números. La elección de la representación es, en teoría, arbitraria. Claro debe estar que, dependerá del problema que se tenga en particular: en cada caso se debe elegir la representación que facilite más los cálculos.

Usando la notación de Dirac, para un espacio arbitrario E se pueden tratar todos los conceptos estudiados para bases discretas o continuas de F .

Se manejan dos relaciones características de las bases en la notación de Dirac: las relaciones de ortonormalización y las relaciones de cerradura. Con estas es posible resolver problemas concernientes a representaciones y la transformación de una representación a otra.

RELACIONES DE LAS BASES ORTONORMALES

Un conjunto de kets, discreto ($\{|u_i\rangle\}$) o continuo ($\{|u_\alpha\rangle\}$), se dice que es ortonormal si satisface las relaciones de ortonormalización:

$$\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij} \quad [6.3.1]$$

O bien,

$$\langle w_\alpha | w_{\alpha'} \rangle = \delta(\alpha - \alpha') \quad [6.3.2]$$

Se puede demostrar para un conjunto continuo, que $\langle w_\alpha | w_\alpha \rangle$ no existe: el ket $|w\rangle$ tiene una norma infinita y por ello no pertenece a E . De cualquier modo, los vectores de E pueden expandirse en términos de $|w_\alpha\rangle$. Usualmente estos kets se consideran una generalización.

RELACIÓN DE CERRADURA

Un conjunto discreto, $\{|u_i\rangle\}$, o uno continuo, $\{|w_\alpha\rangle\}$, constituyen una base si para cada ket $|\psi\rangle$ perteneciente a E se tiene una única expansión en términos de $|u_i\rangle$ o de $|w_\alpha\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \quad [6.3.3]$$

O bien,

$$|\psi\rangle = \int d\alpha c(\alpha) |w_\alpha\rangle \quad [6.3.4]$$

Supóngase más aun, que la base es ortonormal, entonces, al realizar la multiplicación en ambos lados de [6.3.3] por $\langle u_j|$, y en ambos lados de [6.3.4] por $\langle w_\alpha|$, se obtiene, usando [6.3.1] y [6.3.2] expresiones para las componentes c_j o $c(\alpha')$:

$$\langle u_j|\psi\rangle = c_j \quad [6.3.5]$$

$$\langle w_{\alpha'}|\psi\rangle = c(\alpha') \quad [6.3.6]$$

Reemplazando en [6.3.6] c_i por $\langle u_i|\psi\rangle$, y en [6.3.4] $c(\alpha)$ por $\langle w_\alpha|\psi\rangle$:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_i c_i |u_i\rangle = \sum_i \langle u_i|\psi\rangle |u_i\rangle \\ &= \sum_i |u_i\rangle \langle u_i|\psi\rangle = \left(\sum_i |u_i\rangle \langle u_i| \right) |\psi\rangle \end{aligned} \quad [6.3.7]$$

O bien,

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \int c(\alpha) |w_\alpha\rangle = \int d\alpha \langle w_\alpha|\psi\rangle |w_\alpha\rangle \\ &= \int d\alpha |w_\alpha\rangle \langle w_\alpha|\psi\rangle = \left(\int d\alpha |w_\alpha\rangle \langle w_\alpha| \right) |\psi\rangle \end{aligned} \quad [6.3.8]$$

[ya que, en [6.3.7], se puede poner el número $\langle u_i|\psi\rangle$ después del ket $|u_i\rangle$; de la misma manera, en [6.3.8], se puede poner el número $\langle w_\alpha|\psi\rangle$ después del $|w_\alpha\rangle$].

Entonces, se tiene que han aparecido dos operaciones, $\sum_i |u_i\rangle \langle u_i|$ y $\int d\alpha |w_\alpha\rangle \langle w_\alpha|$. Estas actúan sobre todo ket $|\psi\rangle$ perteneciente a E para dar el mismo ket $|\psi\rangle$. Ya que $|\psi\rangle$ es arbitrario, se sigue que:

$$P_{\{u_i\}} = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i| = \mathbb{1} \quad [6.3.9]$$

O bien,

$$P_{\{w_\alpha\}} = \int d\alpha |w_\alpha\rangle \langle w_\alpha| = \mathbb{1} \quad [6.3.10]$$

Donde $\mathbb{1}$ denota al operador identidad en E . Estas relaciones se conocen como *relaciones de cerradura*. También se tiene que las relaciones [6.3.9] y [6.3.10] expresan el hecho de que los conjuntos $\{|u_i\rangle\}$ y $\{|w_\alpha\rangle\}$ constituyen bases. Para todo $|\psi\rangle$ perteneciente a E , se puede escribir:

$$|\psi\rangle = \mathbb{1} |\psi\rangle = P_{\{u_i\}} |\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \quad [6.3.11]$$

Con:

$$c_i = \langle u_i | \psi \rangle \quad [6.3.12]$$

En la misma forma:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \mathbb{1} |\psi\rangle = P_{\{w_\alpha\}} |\psi\rangle = \int d\alpha |w_\alpha\rangle \langle w_\alpha | \psi \rangle \\ &= \int d\alpha c(\alpha) |w_\alpha\rangle \end{aligned} \quad [6.3.13]$$

Con:

$$c(\alpha) = \langle w_\alpha | \psi \rangle \quad [6.3.14]$$

Entonces, cada ket $|\psi\rangle$ tiene una expansión única en $|u_i\rangle$ o en $|w_\alpha\rangle$. Cada uno de estos conjuntos forman bases, una discreta y una continua respectivamente.

COMENTARIOS:

- i) Se tiene que $\sum_i |u_i\rangle \langle u_i|$ es un proyector: el proyector en el subespacio E' expandido por $|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_i\rangle, \dots$. Si $|u_i\rangle$ forma una base, cada ket de E puede ser expandido en términos de $|u_i\rangle$; el subespacio E es entonces idéntico con el propio espacio E .

Consecuentemente, es razonable para $\sum_i |u_i\rangle \langle u_i|$ ser igual al operador identidad: proyectando en E un ket que pertenece a E entonces no modifica este ket.

El mismo argumento puede aplicarse a $\int d\alpha |w_\alpha\rangle \langle w_\alpha|$.

- ii) Se puede encontrar una relación de cerradura equivalente para el espacio tridimensional de la geometría ordinaria, $\mathbf{R}^3$. Si $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$, y $\mathbf{e}_3$ son tres vectores ortonormales de este espacio, y P_1, P_2 y P_3 son los proyectores en esos tres vectores, el hecho de que $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ formen una base en $\mathbf{R}^3$ se expresa por la relación:

$$P_1 + P_2 + P_3 = \mathbb{1} \quad [6.3.15]$$

Por otro lado, $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2\}$ constituyen un conjunto ortonormal pero no una base de $\mathbf{R}^3$. Esto queda expresado por el hecho de que el proyector $P_1 + P_2$ (que proyecta en el plano generado por $\mathbf{e}_1$ y $\mathbf{e}_2$) no es igual a $\mathbb{1}$; por ejemplo: $(P_1 + P_2)\mathbf{e}_3 = 0$.

La siguiente tabla resume las fórmulas fundamentales que se requieren para cualquier cálculo realizado en las representaciones $\{|u_i\rangle\}$ y $\{|w_\alpha\rangle\}$.

Representación $\{ u_i\rangle\}$	Representación $\{ w_\alpha\rangle\}$
$\langle u_i u_j\rangle = \delta_{ij}$ $P_{\{u_i\}} = \sum_i u_i\rangle \langle u_i = \mathbb{1}$	$\langle w_\alpha w_{\alpha'}\rangle = \delta(\alpha - \alpha')$ $P_{\{w_\alpha\}} = \int d\alpha w_\alpha\rangle \langle w_\alpha = \mathbb{1}$

REPRESENTACIÓN DE KETS Y BRAS:

En la base $\{|u_i\rangle\}$, el ket $|\psi\rangle$ se representa por el conjunto de sus componentes, esto es, por el conjunto de números $c_i = \langle u_i|\psi\rangle$.

Estos números pueden ser dispuestos verticalmente para formar una matriz columna (con, en general, un conjunto numerable infinito de renglones):

$$\begin{pmatrix} \langle u_1|\psi\rangle \\ \langle u_2|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle u_i|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \quad [6.3.16]$$

En la base continua $\{|w_\alpha\rangle\}$, el ket $|\psi\rangle$ se representa por un infinito continuo de números, $c(\alpha) = \langle w_\alpha|\psi\rangle$, esto es, por una función de α . Es entonces posible trazar el eje vertical, a lo largo del cual se pueden ubicar algunos posibles valores de α . A cada uno de estos valores le corresponde un número, $\langle w_\alpha|\psi\rangle$:

$$\alpha \downarrow \begin{pmatrix} \vdots \\ \vdots \\ \langle w_\alpha|\psi\rangle \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \quad [6.3.17]$$

REPRESENTACIÓN DE BRAS:

Sea $\langle \varphi |$ un bra arbitrario. En la base $\{|u_i\rangle\}$, se puede escribir:

$$\langle \varphi | = \langle \varphi | \mathbb{1} = \langle \varphi | P_{\{u_i\}} = \sum_i \langle \varphi | u_i \rangle \langle u_i | \quad [6.3.18]$$

$\langle \varphi |$ tiene una única expansión en términos de $\langle u_i |$. Las componentes de $\langle \varphi |$, $\langle \varphi | u_i \rangle$, son complejos conjugados de las componentes $b_i = \langle u_i | \varphi \rangle$ del $|\varphi\rangle$ asociado con $\langle \varphi |$.

De la misma manera, se obtiene, en la base $\{|w_\alpha\rangle\}$:

$$\langle \varphi | = \langle \varphi | \mathbb{1} = \langle \varphi | P_{\{w_\alpha\}} = \int d\alpha \langle \varphi | w_\alpha \rangle \langle w_\alpha | \quad [6.3.19]$$

Las componentes de $\langle \varphi |$, $\langle \varphi | w_\alpha \rangle$, son conjugados complejos de $b(\alpha) = \langle w_\alpha | \varphi \rangle$ del ket $|\varphi\rangle$ asociado con $\langle \varphi |$. Ya que siempre se puede colocar un $\mathbb{1}$ entre $\langle \varphi |$ y $|\psi\rangle$, en la expresión del producto escalar:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \varphi | \mathbb{1} | \psi \rangle = \langle \varphi | P_{\{u_i\}} | \psi \rangle = \sum_i \langle \varphi | u_i \rangle \langle u_i | \psi \rangle = \sum_i b_i^* c_i \quad [6.3.20]$$

Y de la misma forma:

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \psi \rangle &= \langle \varphi | \mathbb{1} | \psi \rangle = \langle \varphi | P_{\{w_\alpha\}} | \psi \rangle \\ &= \sum_i \langle \varphi | w_\alpha \rangle \langle w_\alpha | \psi \rangle = \int d\alpha b^*(\alpha) c(\alpha) \end{aligned} \quad [6.3.21]$$

Ahora, se pueden ordenar las componentes $\langle \varphi | u_i \rangle$ del bra $\langle \varphi |$ horizontalmente, para formar una matriz renglón (teniendo un número infinito de columnas):

$$(\langle \varphi | u_1 \rangle \quad \langle \varphi | u_2 \rangle \quad \dots \quad \langle \varphi | u_i \rangle \quad \dots) \quad [6.3.22]$$

Usando esta convención, $\langle \varphi | \psi \rangle$ es la matriz producto de la matriz columna que representa a $|\psi\rangle$ y la matriz renglón que representa a $\langle \varphi |$. El resultado es una matriz que tiene un renglón y una columna, esto es, un *número*.

En la base $\{|w_\alpha\rangle\}$, $\langle \varphi |$ tiene un infinito continuo de componentes $\langle \varphi | w_\alpha \rangle$. Los valores varios de α se ubican a lo largo del eje horizontal. Cada uno de estos valores corresponde a una componente $\langle \varphi | w_\alpha \rangle$ de $\langle \varphi |$:

$$(\dots \dots \langle \varphi | w_\alpha \rangle \dots \dots) \quad [6.3.23]$$

$\rightarrow \alpha$

COMENTARIO:

En cada representación, las matrices que representan a $|\psi\rangle$ y su bra asociado $\langle\psi|$ son hermitianas conjugadas entre si (en el sentido de las matrices): se pasa de una matriz a otra intercambiando renglones y columnas y tomando el complejo conjugado de cada elemento.

REPRESENTACIÓN DE OPERADORES

Dado un operador lineal A, a través de los conjuntos $\{|u_i\rangle\}$ y $\{|w_\alpha\rangle\}$, se puede asociar con una serie de números definidos por:

$$A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle \quad [6.3.24]$$

O bien,

$$A(\alpha, \alpha') = \langle w_\alpha | A | w_{\alpha'} \rangle \quad [6.3.25]$$

Estos números dependen de dos índices y pueden ser arreglados a modo de una matriz cuadrada teniendo una cantidad numerable, o bien continua infinita, de renglones y columnas. El primer número se usa para denotar renglones y el segundo las columnas. Así que en la base $\{|u_i\rangle\}$ el operador A se puede representar por la matriz:

$$\begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1j} & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \\ A_{i1} & \cdots & A_{ij} & \cdots \\ \vdots & & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad [6.3.26]$$

Se ve que, en la transformación $A|u_j\rangle$ la columna j está compuesta con las componentes $\{|u_i\rangle\}$ de la base, de la transformación $A|u_j\rangle$. Para una base continua el operador A se puede representar como:

$$\alpha \downarrow \begin{pmatrix} \cdots & A(\alpha, \alpha') & \cdots \\ \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \quad [6.3.27]$$

Se puede usar la relación de cerradura para calcular la matriz que representa al operador AB en la base $\{|u_i\rangle\}$:

$$\begin{aligned} \langle u_i | AB | u_j \rangle &= \langle u_i | A \uparrow B | u_j \rangle = \langle u_i | A P_{\{u_i\}} B | u_j \rangle \\ &= \sum_k \langle u_i | A | u_k \rangle \langle u_k | B | u_j \rangle \end{aligned} \quad [6.3.28]$$

La convención elegida para el arreglo de elementos A_{ij} [o $A(\alpha, \alpha')$] consiste en relacionar el producto de dos matrices: la ecuación anterior expresa esa matriz representada por AB , como el producto de matrices asociadas con A y B .

REPRESENTACIÓN MATRICIAL DEL KET $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$:

Conociendo las componentes de $|\psi\rangle$ y de los elementos de la matriz A en una representación dada, se desea calcular las componentes de $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$ en la misma representación.

En la base $\{|u_i\rangle\}$, las coordenadas c_i' de $|\psi'\rangle$ están dadas por:

$$c_i' = \langle u_i | \psi' \rangle = \langle u_i | A | \psi \rangle \quad [6.3.29]$$

Si se inserta la relación de cerradura entre A y $|\psi\rangle$, se obtiene:

$$\begin{aligned} c_i' &= \langle u_i | A \mathbb{1} | \psi \rangle = \langle u_i | A P_{\{u_i\}} | \psi \rangle = \sum_j \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | \psi \rangle \\ &= \sum_j A_{ij} c_j \end{aligned} \quad [6.3.30]$$

Para la base $\{|w_\alpha\rangle\}$, se obtiene:

$$\begin{aligned} c'(\alpha) &= \langle w_\alpha | \psi' \rangle = \langle w_\alpha | A | \psi \rangle \\ &= \int d\alpha' \langle w_\alpha | A | w_{\alpha'} \rangle \langle w_{\alpha'} | \psi \rangle \\ &= \int d\alpha' A(\alpha, \alpha') c(\alpha') \end{aligned} \quad [6.3.31]$$

La expresión para la matriz $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$ es, entonces, muy simple. Del ejemplo [6.3.30] se ve que la columna de la matriz representa $|\psi'\rangle$, es igual al producto de la matriz columna $|\psi\rangle$ y la matriz cuadrada A :

$$\begin{pmatrix} c_1' \\ \vdots \\ c_j' \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1j} & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \\ A_{i1} & \cdots & A_{ij} & \cdots \\ \vdots & & \ddots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_j \\ \vdots \end{pmatrix} \quad [6.3.32]$$

EXPRESIÓN DEL NÚMERO $\langle \phi | A | \psi \rangle$:

Insertando la relación de cerradura entre $\langle \phi |$ y A y después entre A y $|\psi\rangle$, se obtiene:

–Para la base $\{|u_i\rangle\}$:

$$\begin{aligned}\langle \phi | A | \psi \rangle &= \langle \phi | P_{\{u_i\}} A P_{\{u_j\}} | \psi \rangle = \sum_{i,j} \langle \phi | u_i \rangle \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | \psi \rangle \\ &= \sum_{i,j} b_i^* A_{ij} c_j\end{aligned}\quad [6.3.33]$$

–Para la base $\{|w_\alpha\rangle\}$

$$\begin{aligned}\langle \phi | A | \psi \rangle &= \langle \phi | P_{\{w_\alpha\}} A P_{\{w_{\alpha'}\}} | \psi \rangle \\ &= \iint d\alpha d\alpha' \langle \phi | w_\alpha \rangle \langle w_\alpha | A | w_{\alpha'} \rangle \langle w_{\alpha'} | \psi \rangle \\ &= \iint d\alpha d\alpha' b^*(\alpha) A(\alpha, \alpha') c(\alpha')\end{aligned}\quad [6.3.34]$$

La interpretación de estas ecuaciones en el formalismos de matrices es: $\langle \phi | A | \psi \rangle$ es un número; esto es, una matriz con un renglón y una columna, obtenido al multiplicar la matriz columna que representa a $|\psi\rangle$ por la matriz cuadrada que representa a A y luego por la matriz renglón que representa a $\langle \phi |$. Por ejemplo, en la base $\{|u_i\rangle\}$:

$$\langle \phi | A | \psi \rangle = (b_1^* \dots b_i^* \dots) \begin{pmatrix} A_{11} & \dots & A_{1j} & \dots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \\ A_{i1} & \dots & A_{ij} & \dots \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_j \\ \vdots \end{pmatrix}\quad [6.3.35]$$

COMENTARIOS:

- i) Se puede demostrar de la misma manera, que el bra $\langle \phi | A$ está representado por una matriz renglón, el producto de la matriz cuadrada A por la matriz renglón $\langle \phi |$. Aquí se puede apreciar la importancia del orden de los símbolos: la expresión $A \langle \phi |$ daría una operación de matrices que no está definida (el producto de una matriz renglón por una matriz cuadrada).
- ii) Desde el punto de vista matricial la ecuación [6.2.31] que define $\langle \phi | A$ representa la asociatividad del producto de las tres matrices que aparecen en [6.3.35].

- iii) Usando las convenciones precedentes, se puede expresar $|\psi\rangle \langle \psi|$ por la matriz cuadrada:

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_j \\ \vdots \end{pmatrix} (c_1^* \dots c_i^* \dots) = \begin{pmatrix} c_1 c_1^* & \dots & c_1 c_j^* & \dots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots \\ c_i c_1^* & \dots & c_i c_j^* & \dots \\ \vdots & & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad [6.3.36]$$

Esto es en efecto un operador, mientras que $\langle \psi|\psi \rangle$, es el producto de una matriz columna por una matriz renglón, es decir, un número.

REPRESENTACIÓN MATRICIAL DEL OPERADOR ADJUNTO $A^\dagger$ DE A :

Usando [6.2.39], fácilmente se obtiene:

$$(A^\dagger)_{ij} = \langle u_i | A^\dagger | u_j \rangle = \langle u_j | A | u_i \rangle^* = A_{ji}^* \quad [6.3.37]$$

O bien,

$$A^\dagger(\alpha, \alpha') = \langle w_\alpha | A^\dagger | w_{\alpha'} \rangle = \langle w_{\alpha'} | A | w_\alpha \rangle^* = A^*(\alpha, \alpha') \quad [6.3.38]$$

Entonces, las matrices que representan a A y $A^\dagger$ son conjugadas hermitianas entre sí; en el sentido matricial: *se pasa de una a la otra intercambiando renglones por columnas y tomando el complejo conjugado.*

Si A es hermitiana, $A^\dagger = A$, y se puede reemplazar $(A^\dagger)_{ij}$ por A_{ij} en [6.3.37], y $A^\dagger(\alpha, \alpha')$ por $A(\alpha, \alpha')$ en [6.3.38].

$$A_{ij} = A_{ji}^* \quad [6.3.39]$$

$$A(\alpha, \alpha') = A^*(\alpha', \alpha) \quad [6.3.40]$$

Un operador hermitiano entonces se puede representar por una matriz; donde:

Cualquiera dos elementos simétricos respecto a la diagonal principal son complejos conjugados entre sí.

En particular, para $i = j$ ó $\alpha = \alpha'$ [6.3.39] y [6.3.40] vienen siendo:

$$A_{ii} = A_{ii}^* \quad [6.3.41]$$

$$A(\alpha, \alpha) = A^*(\alpha, \alpha) \quad [6.3.42]$$

Los elementos de la diagonal de una matriz hermitiana son siempre números reales.

6.4 Ecuaciones de valores propios y observables

VALORES Y VECTORES PROPIOS DE UN OPERADOR

Se dice que $|\psi\rangle$ es un vector propio (o ket propio o eigen-ket) del operador A si:

$$A |\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle \quad [6.4.1]$$

Donde λ es un número complejo. En general esta ecuación posee soluciones solo cuando λ toma ciertos valores, llamados valores propios (o eigen-valores) de A. El conjunto de valores propios se conoce como *espectro* de A.

Si $|\psi\rangle$ es un vector propio de A con el valor propio λ , $\alpha|\psi\rangle$ (donde α es un número complejo arbitrario) es también un vector propio de A con el mismo valor propio:

$$A(\alpha |\psi\rangle) = \alpha A |\psi\rangle = \alpha \lambda |\psi\rangle = \lambda(\alpha |\psi\rangle) \quad [6.4.2]$$

Usualmente se usan vectores propios normalizados a 1; es decir:

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad [6.4.3]$$

Se dice que el valor propio λ es *no degenerado* (o simple) cuando su correspondencia con un vector propio es única con a lo más un factor constante; es decir, cuando todos sus kets propios asociados son colineales. Por otro lado, si existen al menos dos kets linealmente independientes que son vectores propios de A con el mismo valor propio se dice que es *degenerado*. El grado de degeneración es entonces el número de vectores propios asociados con este que son linealmente independientes, y este grado puede ser finito o infinito. Por ejemplo, si λ tiene el grado de degeneración g, entonces le corresponden un número g de kets independientes $|\psi^i\rangle$ ($i = 1, 2, \dots, g$). Así:

$$A |\psi^i\rangle = \lambda |\psi^i\rangle \quad [6.4.4]$$

Todo $|\psi\rangle$ de la forma:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n c_i |\psi^i\rangle \quad [6.4.5]$$

Es un vector propio de A con un valor propio λ , sin importar los coeficientes c_i , ya que:

$$A |\psi\rangle = \sum_{i=1}^g c_i A |\psi^i\rangle = \lambda \sum_{i=1}^g c_i |\psi^i\rangle = \lambda |\psi\rangle \quad [6.4.6]$$

Consecuentemente, el conjunto de kets propios de A asociados con λ constituyen un espacio vectorial g-dimensional, llamado *subespacio propio* del valor propio λ .

Para ilustrar las anteriores definiciones, elegimos como ejemplo el proyector $P_\psi = |\psi\rangle \langle \psi|$ (con $\langle \psi|\psi\rangle = 1$). Su ecuación de valores propios es:

$$P_\psi |\phi\rangle = \lambda |\phi\rangle$$

Esto es:

$$|\psi\rangle \langle \psi|\phi\rangle = \lambda |\phi\rangle \quad [6.4.7]$$

El ket de la izquierda siempre es colineal con $|\psi\rangle$ o cero. Consecuentemente, los vectores propios de P_ψ son: $|\psi\rangle$, con valor propio $\lambda = 1$, y por otro lado, todos los kets $|\phi\rangle$ ortogonales a $|\psi\rangle$, para los cuales su valor propio es $\lambda = 0$. El espectro de P_ψ incluye entonces dos valores: 1 y 0. El primero es simple, el segundo infinitamente degenerado (si el espacio considerado es infinitamente dimensional).

COMENTARIOS:

- i) Tomando el conjugado hermitiano de ambos lados de la ecuación [6.4.1], se obtiene:

$$\langle \psi| A^\dagger = \lambda^* \langle \psi| \quad [6.4.8]$$

Entonces, si $|\psi\rangle$ es un ket propio de A con el valor propio λ , puede decirse que $\langle \psi|$ es un bra propio de $A^\dagger$ con valor propio λ^* .

- ii) Para ser completamente rigurosos, se debe resolver la ecuación D-1) en el espacio E . Es decir que se deben considerar solo los vectores propios $|\psi\rangle$ que tengan norma finita.

Considérese el caso en que el espacio de estados es finito con dimensión N (los resultados se pueden generalizar a espacios de estados infinitos).

Para una representación tal como $\{|u_i\rangle\}$ y usando la ecuación de proyección D-1) en varios de los vectores ortonormales de la base $\{|u_i\rangle\}$, se puede escribir:

$$\langle u_i| A |\psi\rangle = \lambda \langle u_i|\psi\rangle \quad [6.4.9]$$

Insertando la relación de cerradura entre A y $|\psi\rangle$, se obtiene:

$$\sum_j \langle u_i| A |u_j\rangle \langle u_j|\psi\rangle = \lambda \langle u_i|\psi\rangle \quad [6.4.10]$$

Que en notación usual:

$$\langle u|\psi\rangle = c_i \quad [6.4.11]$$

$$\langle u_i| A |u_j\rangle = A_{ij}$$

Las ecuaciones [6.4.11] se pueden escribir:

$$\sum_j A_{ij} c_j = \lambda c_i \quad [6.4.12]$$

O bien,

$$\sum_j [A_{ij} - \delta_{ij}] c_j = 0 \quad [6.4.13]$$

La expresión D-13) puede considerarse como un sistema de ecuaciones donde las c_j son las incógnitas, las componentes del vector propio en la representación elegida.

LA ECUACIÓN CARACTERÍSTICA:

El sistema D-13) consiste en N ecuaciones ($i = 1, 2, \dots, N$) en N incógnitas c_j ($j = 1, 2, \dots, N$). Ya que es lineal y homogéneo, tiene una solución no trivial (la solución trivial es aquella en que todas las c_j son cero) si y solo si el determinante de los coeficientes es cero. Esta condición se escribe:

$\text{Det } [A - \lambda I] \equiv 0$

[6.4.14]

Donde A es la matriz de $N \times N$ elementos A_{ij} e I es la matriz unitaria.

La ecuación D-14), es llamada ecuación característica, y permite determinar todos los valores propios del operador A ; esto es, su espectro. La ecuación D-14) se puede escribir explícitamente en la forma:

$$\begin{vmatrix} A_{11} - \lambda & \cdots & A_{1N} - \lambda \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} - \lambda & \cdots & A_{NN} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad [6.4.15]$$

Que es una ecuación de orden N en λ ; consecuentemente, tiene N raíces, reales o imaginarias, distintas o idénticas. Se puede demostrar que la ecuación característica es independiente de la representación elegida. Así que, *los valores propios de un operador son las raíces de su ecuación característica.*

DETERMINACIÓN DE LOS VECTORES PROPIOS:

Ahora elíjase un valor propio λ_0 , como solución de la ecuación característica [6.4.14], entonces para encontrar sus correspondientes vectores propios hay que distinguir dos casos:

- i) Si λ_0 es una raíz simple de la ecuación característica. Entonces, el sistema [6.4.13], cuando $\lambda = \lambda_0$, se compone de $(N - 1)$ ecuaciones independientes, la N -ésima ecuación es redundante. Como se tienen N incógnitas, hay un número infinito de soluciones, pero las c_j pueden ser determinadas de manera única, en términos de una de ellas, digamos c_1 . Si se fija c_1 se obtiene para las otras $(N - 1)$ c_j un sistema lineal de $(N - 1)$ ecuaciones in homogéneas, (el “lado derecho” de cada una estará en términos de c_1) con un determinante diferente de cero [las $(N - 1)$ ecuaciones son independientes]. La solución del sistema es de la forma:

$$c_j = \alpha_j^0 c_1 \quad [6.4.16]$$

ya que el sistema inicial D-13) es lineal y homogéneo. α_1^0 es, desde luego igual a 1 por definición, y los $(N - 1)$ coeficientes α_j^0 para $j \neq 1$ están determinados por los elementos de la matriz A_{ij} y λ_0 . Los vectores propios asociados con λ_0 difieren solo por el valor elegido para c_1 . Estos están dados por:

$$|\psi_0(c_1)\rangle = \sum_j \alpha_j^0 c_1 |u_j\rangle = c_1 |\psi_0\rangle \quad [6.4.17]$$

con:

$$|\psi_0\rangle = \sum_j \alpha_j^0 |u_j\rangle \quad [6.4.18]$$

Entonces, cuando λ_0 es una raíz simple de la ecuación característica, solo un vector propio corresponde a esta (salvo por un factor constante): es un valor propio no degenerado.

- ii) Cuando λ_0 es una raíz múltiple de orden $q > 1$ de la ecuación característica hay dos posibilidades:

– En general, cuando $\lambda = \lambda_0$, el sistema está compuesto aun de $(N - 1)$ ecuaciones independientes. Solo un vector propio corresponde al valor propio λ_0 . El operador A no puede ser diagonalizado en este caso: los vectores propios de A no son suficientemente numerosos como para construir una base del espacio de estados.

– No obstante, cuando $\lambda = \lambda_0$, puede ocurrir que el sistema D-13) tenga solamente $(N - p)$ ecuaciones independientes (donde p es un número más grande que 1 pero no mayor que q). Para el valor propio λ_0 corresponde un subespacio propio de dimensión p , y λ_0 es un valor degenerado de orden p .

Supóngase, por ejemplo, que $\lambda = \lambda_0$, compuesto por $(N - 2)$ ecuaciones independientes. Estas ecuaciones permiten calcular los coeficientes c_j en términos de cualquiera de las dos, digamos, c_1 y c_2 :

$$c_j = \beta_j^0 c_1 + \gamma_j^0 c_2 \quad [6.4.19]$$

(Obviamente: $\beta_1^0 = \gamma_2^0 = 1$; y $\gamma_1^0 = \beta_2^0 = 0$). Todos los vectores propios asociados con λ_0 son entonces de la forma:

$$|\psi_0(c_1, c_2)\rangle = c_1 |\psi_0^1\rangle + c_2 |\psi_0^2\rangle \quad [6.4.20]$$

Con:

$$|\psi_0^1\rangle = \sum_j \beta_j^0 |u_j\rangle$$

$$|\psi_0^2\rangle = \sum_j \gamma_j^0 |u_j\rangle \quad [6.4.21]$$

Los vectores $|\psi_0(c_1, c_2)\rangle$ constituyen un espacio vectorial bidimensional, que se caracteriza por un valor propio degenerado de orden 2.

Cuando un operador es hermitiano, puede demostrarse que el grado de degeneración p de un valor propio λ es siempre igual a la multiplicidad q de la raíz correspondiente en la ecuación característica.

Como, en un espacio finito de dimensión N , un operador hermitiano siempre tiene N vectores propios linealmente independientes (que se pueden elegir ortonormales) este operador siempre puede ser diagonalizado.

VALORES Y VECTORES PROPIOS DE UN OPERADOR HERMITIANO:

Considérese el importante caso de un operador hermitiano:

$$A = A^\dagger \quad [6.4.22]$$

i) *Los valores propios de un operador hermitiano son reales*

Tomando el producto escalar de la ecuación de valor propio [6.4.1] por $|\psi\rangle$, se obtiene:

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \lambda \langle \psi | \psi \rangle \quad [6.4.23]$$

Como $\langle \psi | A | \psi \rangle$ es un número real, la ecuación [6.4.23] implica que λ también debe ser real.

Si A es hermitiano, se puede, en [6.4.8], reemplazar A por $A^\dagger$ y λ por λ^* . Así se obtiene:

$$\langle \psi | A = \lambda \langle \psi | \quad [6.4.24]$$

Que muestra que $\langle \psi |$ también es un bra propio de A con el valor propio λ .

Entonces, para cualquier ket $|\phi\rangle$:

$$\langle \psi | A |\phi\rangle = \lambda \langle \psi | \phi \rangle \quad [6.4.25]$$

Se dice que el operador hermitiano A actúa hacia la izquierda en D-26)

- ii) *Dos vectores propios de un operador hermitiano que corresponden a dos valores propios diferentes son ortogonales*

Considérense dos vectores propios $|\psi\rangle$ y $|\phi\rangle$ del operador hermitiano A :

$$A |\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle \quad [6.4.26]$$

$$A |\phi\rangle = \mu |\phi\rangle \quad [6.4.27]$$

Ya que A es hermitiano, [6.4.27] puede escribirse en la forma:

$$\langle \phi | A = \mu \langle \phi | \quad [6.4.28]$$

Multiplicando [6.4.26] por $\langle \phi |$ a la izquierda y [6.4.28] por $|\psi\rangle$ a la derecha:

$$\langle \phi | A |\psi\rangle = \lambda \langle \phi | \psi \rangle \quad [6.4.29]$$

$$\langle \phi | A |\psi\rangle = \mu \langle \phi | \psi \rangle$$

Restando la segunda ecuación de la primera, se encuentra:

$$(\lambda - \mu) \langle \phi | \psi \rangle = 0 \quad [6.4.30]$$

Consecuentemente, si $(\lambda - \mu) \neq 0$, $|\phi\rangle$ y $|\psi\rangle$ son ortogonales.

DEFINICIÓN DE OBSERVABLE:

Cuando E es de dimensión finita, siempre es posible formar una base con los vectores propios de un operador hermitiano. Cuando E tiene dimensión infinita no resulta necesario. Por ello resulta de gran utilidad introducir el concepto de observable.

Considérese un operador hermitiano A. Por simplicidad, se asume que el conjunto de valores propios forma un espectro discreto $\{a_n; n = 1, 2, \dots\}$, El grado de degeneración del valor propio a_n puede denotarse por g_n . Se denota por $|\psi_n^i\rangle$ ($i = 1, 2, \dots, g_n$) a los g_n vectores linealmente independientes elegidos en el subespacio E_n de a_n :

$$A |\psi_n^i\rangle = a_n |\psi_n^i\rangle; i = 1, 2, \dots, g_n \quad [6.4.31]$$

Como todo vector en E_n es ortogonal a cualquier otro vector en $E_{n'}$ asociado con $a_{n'} \neq a_n$; entonces:

$$\langle \psi_n^i | \psi_{n'}^j \rangle = 0 \quad [6.4.32]$$

Dentro de cada subespacio E_n , el $|\psi_n^i\rangle$ puede ser elegido ortonormal, esto es, como:

$$\langle \psi_n^i | \psi_n^j \rangle = \delta_{ij} \quad [6.4.33]$$

Si se hace esta elección, el resultado es un *sistema ortonormal de vectores propios de A*: el $|\psi_n^i\rangle$ satisface las relaciones:

$$\langle \psi_n^i | \psi_{n'}^{i'} \rangle = \delta_{nn'} \delta_{ii'} \quad [6.4.34]$$

Que se obtienen reagrupando [6.4.32] y [6.4.33].

Por definición, un operador hermitiano A es un *observable* si este sistema de vectores ortonormales forma una base en el espacio de estados. Esto puede expresarse con la relación de cerradura:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{g_n} |\psi_n^i\rangle \langle \psi_n^i| = \mathbb{1} \quad [6.4.35]$$

CONJUNTOS DE OBSERVABLES QUE CONMUTAN

TEOREMA I:

Si dos operadores A y B conmutan, y $|\psi\rangle$ es un vector propio de A, $B|\psi\rangle$ es también un vector propio de A, con el mismo valor propio.

Entonces, si $|\psi\rangle$ es un vector propio de A, se tiene que:

$$A |\psi\rangle = a |\psi\rangle \quad [6.4.36]$$

Aplicando B a ambos lados de esta ecuación, se obtiene:

$$BA |\psi\rangle = aB |\psi\rangle \quad [6.4.37]$$

Ya que A y B conmuta, se puede reemplazar BA en el lado izquierdo por AB:

$$A(B|\psi\rangle) = a(B|\psi\rangle) \quad [6.4.38]$$

Esta ecuación expresa el hecho de que $B|\psi\rangle$ es un vector propio de A, con valor propio a; de modo que el teorema queda probado.

Se tienen dos casos:

- i) Si a es un valor propio *no* degenerado, todos sus vectores propios asociados son por definición colineales, y $B|\psi\rangle$ es proporcional a $|\psi\rangle$. Entonces $|\psi\rangle$ es también un vector propio de B.
- ii) Si a es un valor propio degenerado, solo se puede decir que $B|\psi\rangle$ pertenece al subespacio E_a de A, correspondiendo al valor propio a. Entonces, para cualquier $|\psi\rangle \in E_a$, se tiene:

$$B|\psi\rangle \in E_a \quad [6.4.39]$$

Se dice que E_a es globalmente invariante (o estable) bajo la acción de B. El Teorema I puede entonces establecerse en otra forma:

Teorema I' : si dos operadores A y B conmutan, cualquier subespacio propio de A es globalmente invariante bajo la acción de B.

TEOREMA II:

Si dos observables A y B conmutan, y si $|\psi_1\rangle$ y $|\psi_2\rangle$ son dos vectores propios de A con diferentes valores propios, el elemento de matriz $\langle \psi_1 | B | \psi_2 \rangle$ es cero.

Si $|\psi_1\rangle$ y $|\psi_2\rangle$ son vectores propios de A, se puede escribir:

$$\begin{aligned} A |\psi_1\rangle &= a_1 |\psi_1\rangle \\ A |\psi_2\rangle &= a_2 |\psi_2\rangle \end{aligned} \quad [6.4.40]$$

De acuerdo con el Teorema I, el hecho de que A y B conmuten significa que $B|\psi_2\rangle$ es un vector propio de A, con valor propio a_2 . $B|\psi_2\rangle$ es entonces ortogonal a $|\psi_1\rangle$ (vector propio con valor propio $a_1 \neq a_2$), por lo que se puede escribir:

$$\langle \psi_1 | B | \psi_2 \rangle = 0 \quad [6.4.41]$$

El teorema queda entonces probado. También se puede dar otra prueba que no utiliza el Teorema I: ya que $[A, B] = 0$, se tiene:

$$\langle \psi_1 | (AB - BA) | \psi_2 \rangle = 0 \quad [6.4.42]$$

Usando [6.4.40] y la hermiticidad de A [6.4.25], se obtiene:

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | AB | \psi_2 \rangle &= a_1 \langle \psi_1 | B | \psi_2 \rangle \\ \langle \psi_1 | BA | \psi_2 \rangle &= a_2 \langle \psi_1 | B | \psi_2 \rangle \end{aligned} \quad [6.4.43]$$

Por lo que [6.4.42] puede describirse como:

$$(a_1 - a_2) \langle \psi_1 | B | \psi_2 \rangle = 0 \quad [6.4.44]$$

Ya que por hipótesis $(a_1 - a_2) \neq 0$, se puede deducir D-48) en esta forma.

TEOREMA III:

Si dos observables A y B conmutan, se puede construir una base ortonormal del espacio de estados con vectores propios comunes a A y B.

Considérense dos observables conmutables, A y B. Para simplificar la notación, se asume que el espectro es discreto enteramente. Ya que A es un observable, existe al menos un sistema ortonormal de vectores propios de A que forman una base en el espacio de estados. Se pueden denotar a esos vectores con $|u_n^i\rangle$:

$$\begin{aligned} A |u_n^i\rangle &= a_n |u_n^i\rangle; \quad n = 1, 2, \dots \\ i &= 1, 2, \dots, g_n \end{aligned} \quad [6.4.45]$$

Donde g_n es el grado de degeneración del valor propio a_n , esto es, la dimensión del subespacio propio correspondiente E_n . Entonces se tiene:

$$\langle u_n^i | u_n^{i'} \rangle = \delta_{nn'} \delta_{ii'} \quad [6.4.46]$$

Los elementos de la matriz $\langle u_n^i | B | u_n^{i'} \rangle$ son cero cuando $n \neq n'$, más no se puede decir nada cuando $n = n'$ e $i \neq i'$. Ordenando los vectores base $|u_n^i\rangle$ en el orden:

$$|u_1^1\rangle, |u_1^2\rangle, \dots, |u_1^{g_1}\rangle; \quad |u_2^1\rangle, |u_2^2\rangle, \dots, |u_2^{g_2}\rangle; \quad |u_3^1\rangle, \dots$$

Y disponiéndolos por renglones, se obtiene una matriz cuyos únicos elementos diferentes de cero son los de la diagonal.

Así se tienen dos casos:

- i) Cuando a_n es un valor propio no degenerado de A , existe solo un vector propio $|u_n\rangle$ de A , con valor propio a_n (el índice i en $|u_n\rangle$ resulta innecesario). La matriz resulta ser de 1×1 ; es decir, solo es un número simple.
- ii) Cuando a_n es un valor propio degenerado. B queda representado por la matriz con elementos:

$$\beta_{ij}^{(n)} = \langle u_n^i | B | u_n^{i'} \rangle \quad [6.4.47]$$

Como esta matriz es hermitiana ($\beta_{ij}^{(n)*} = \beta_{ji}^{(n)}$) se puede encontrar una nueva base para que B quede descrito por los elementos de la diagonal:

$$\langle v_n^i | B | v_n^{i'} \rangle = \beta_{ij}^{(n)} \delta_{ij} \quad [6.4.48]$$

Estos vectores son automáticamente vectores propios de A con el valor propio asociado a_n .

DEFINICIÓN: un conjunto de observables $A, B, C, \dots$ es llamado conjunto completo de observables que conmutan si:

- i) Todos los observables conmutan por pares.
- ii) Especificando los valores propios de todos los operadores $A, B, C, \dots$ se determina de manera única (salvo por un factor de multiplicación) un vector propio común. Es decir, si existe una única base ortonormal de los vectores propios comunes.

6.5 Representaciones y observables

A cada función de onda $\psi(\mathbf{r})$ se le hace corresponder un ket $|\psi\rangle$ perteneciente al espacio de estados de la partícula E_r (sin espín); esta correspondencia es lineal. Más aún, el producto escalar de dos kets coincide con aquello con lo que las funciones están asociadas:

$$\langle \phi | \psi \rangle \equiv \int d^3r \phi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad [6.5.1]$$

LAS REPRESENTACIONES $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ y $\{|\mathbf{p}\rangle\}$

Para dos bases particulares de F : $\{\xi_{\mathbf{r}0}(\mathbf{r})\}$ y $\{v_{\mathbf{p}0}(\mathbf{r})\}$, cuando estas no están compuestas de funciones pertenecientes a F se puede escribir:

$$\xi_{\mathbf{r}0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \quad [6.5.2]$$

$$v_{\mathbf{p}0}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{r}}$$

Cualquier función suficientemente regular cuadrado-integrable puede ser expandida en términos de cualquiera de estas “bases”. Esta es la razón por la cual se hace la siguiente asociación:

$\xi_{\mathbf{r}0}(\mathbf{r}) \Leftrightarrow \mathbf{r}_0\rangle$	[6.5.3]
$v_{\mathbf{p}0}(\mathbf{r}) \Leftrightarrow \mathbf{p}_0\rangle$	[6.5.4]

Usando las bases mencionadas, se definen ahora dos representaciones: $\{|\mathbf{r}_0\rangle\}$ y $\{|\mathbf{p}_0\rangle\}$. Un vector base de la primera se caracteriza por tres “índices continuos” x_0 , y_0 y z_0 , que son las coordenadas de un punto en el espacio tridimensional; para la segunda, tres índices harán las veces de las componentes de un vector ordinario.

ORTONORMALIZACIÓN Y RELACIÓN DE CERRADURA:

Ahora se calcula $\langle \mathbf{r}_0 | \mathbf{r}'_0 \rangle$ usando la definición de producto escalar en E_r :

$$\langle \mathbf{r}_0 | \mathbf{r}'_0 \rangle = \int d^3r \xi_{\mathbf{r}0}^*(\mathbf{r}) \xi_{\mathbf{r}'0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \quad [6.5.5]$$

De la misma manera:

$$\langle \mathbf{p}_0 | \mathbf{p}'_0 \rangle = \int d^3r v_{\mathbf{r}0}^*(\mathbf{r}) v_{\mathbf{r}'0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) \quad [6.5.6]$$

Las bases recién definidas son ortonormales.

El hecho de que el conjunto de $|\mathbf{r}_0\rangle$ ó $|\mathbf{p}_0\rangle$ constituyen bases en E_r puede expresarse por la relación de cerradura.

Así se tienen las siguientes relaciones fundamentales:

$\langle \mathbf{r}_0 \mathbf{r}'_0 \rangle \equiv \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \quad \text{(a)}$	$\langle \mathbf{p}_0 \mathbf{p}'_0 \rangle \equiv \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) \quad \text{(c)}$	[6.5.7]
$\int d^3 r_0 \mathbf{r}_0\rangle \langle \mathbf{r}_0 \equiv \mathbf{1} \quad \text{(b)}$	$\int d^3 p_0 \mathbf{p}_0\rangle \langle \mathbf{p}_0 \equiv \mathbf{1} \quad \text{(d)}$	

COMPONENTES DEL KET:

Considérese un ket arbitrario $|\psi\rangle$, correspondiente a la función de onda $\psi(\mathbf{r})$. Las relaciones de cerradura permiten escribir $|\psi\rangle$ de cualquiera de las siguientes dos formas:

$$|\psi\rangle = \int d^3 r_0 |\mathbf{r}_0\rangle \langle \mathbf{r}_0 | \psi \rangle \quad [6.5.8]$$

$$|\psi\rangle = \int d^3 p_0 |\mathbf{p}_0\rangle \langle \mathbf{p}_0 | \psi \rangle \quad [6.5.9]$$

Los coeficientes $\langle \mathbf{r}_0 | \psi \rangle$ y $\langle \mathbf{p}_0 | \psi \rangle$ pueden ser calculados usando las fórmulas:

$$\langle \mathbf{r}_0 | \psi \rangle = \int d^3 r \xi_{\mathbf{r}_0}^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad [6.5.10]$$

$$\langle \mathbf{p}_0 | \psi \rangle = \int d^3 r v_{\mathbf{p}_0}^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad [6.5.11]$$

Entonces, se tiene que:

$\langle \mathbf{r}_0 \psi \rangle = \psi(\mathbf{r}_0)$	[6.5.12]
$\langle \mathbf{p}_0 \psi \rangle = \bar{\psi}(\mathbf{p}_0)$	

Donde $\bar{\psi}(\mathbf{p}_0)$ es la transformada de Fourier de $\psi(\mathbf{r})$.

El valor $\psi(\mathbf{r}_0)$ de la función de onda en el punto $\mathbf{r}_0$ es entonces la componente de $|\psi\rangle$ en la base del vector $|\mathbf{r}_0\rangle$ de la representación $\{|\mathbf{r}_0\rangle\}$. La función de onda en el espacio de cantidad de movimiento (*momentum*) $\bar{\psi}(\mathbf{p})$ puede interpretarse de manera análoga.

Por ejemplo, para $|\psi\rangle = |\mathbf{p}_0\rangle$, la primera fórmula [6.5.12] da:

$$\langle \mathbf{r}_0 | \mathbf{p}_0 \rangle = v_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r}_0) = (2\pi \hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{r}_0} \quad [6.5.13]$$

Para $|\psi\rangle = |\mathbf{r}'_0\rangle$, el resultado resulta, en concordancia con la relación de ortonormalización [6.5.7-a]:

$$\langle \mathbf{r}_0 | \mathbf{r}'_0 \rangle = \xi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}_0) = \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}'_0) \quad [6.5.14]$$

Ahora que se ha reinterpretado la función de onda $\psi(\mathbf{r})$ y su transformada de Fourier $\bar{\psi}(\mathbf{p})$, se puede denotar a los vectores base de las dos representaciones simplemente por $|\mathbf{r}\rangle$ y $|\mathbf{p}\rangle$, en vez de $|\mathbf{r}_0\rangle$ y $|\mathbf{p}_0\rangle$. Las fórmulas [6.5.12] se pueden escribir ahora como:

$$\langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r}) \quad [6.5.15]$$

$$\langle \mathbf{p} | \psi \rangle = \bar{\psi}(\mathbf{p}) \quad [6.5.16]$$

Y las relaciones de ortonormalización y cerradura [6.5.7] vienen a ser:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle \equiv \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\text{a}) \quad \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle \equiv \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (\text{c}) \quad [6.5.17]$$

$$\int d^3\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| \equiv \mathbf{1} \quad (\text{b}) \quad \int d^3\mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| \equiv \mathbf{1} \quad (\text{d})$$

Desde luego $\mathbf{r}$ y $\mathbf{p}$ siguen siendo considerados como dos conjuntos de índices continuos, $\{x, y, z\}$ y $\{p_x, p_y, p_z\}$ que fijan la base de los kets de la representaciones $|\mathbf{r}\rangle$ y $|\mathbf{p}\rangle$ respectivamente.

Como ejemplo, ahora considérese $\{u_i(\mathbf{r})\}$ una base ortonormal de F . Con cada $u_i(\mathbf{r})$ hay un ket asociado $|u_i\rangle$ de E_r . El conjunto $\{|u_i\rangle\}$ forma una base ortonormal en E_r ; de modo que satisface la relación de cerradura:

$$\sum_i |u_i\rangle \langle u_i| = \mathbf{1} \quad [6.5.18]$$

Evaluando el elemento de matriz en ambos lados de [6.5.18] entre $|\mathbf{r}\rangle$ y $|\mathbf{r}'\rangle$:

$$\sum_i \langle \mathbf{r} | u_i \rangle \langle u_i | \mathbf{r}' \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{1} | \mathbf{r}' \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle \quad [6.5.19]$$

De acuerdo con [6.5.15] y [6.5.7-a], esta relación se puede escribir como:

$$\sum_i u_i(\mathbf{r}) u_i^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad [6.5.20]$$

Que es la relación de cerradura para $\{u_i(\mathbf{r})\}$ [6.1.30] es entonces simplemente la expresión en la representación $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ de la relación de cerradura vectorial [6.5.18].

EL PRODUCTO ESCALAR DE DOS VECTORES:

Se ha definido el producto escalar de dos kets pertenecientes a E_r de la misma manera que para las funciones de onda asociadas pertenecientes a F . Por otro lado, [6.5.1] puede, de hecho, ser derivada insertando la relación de cerradura [6.5.1] entre $\langle \phi |$ y $|\psi\rangle$:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int d^3r \langle \phi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \quad [6.5.21]$$

E interpretando las componentes $\langle \mathbf{r} | \psi \rangle$ y $\langle \mathbf{r} | \phi \rangle$ como en [6.5.12].

En la representación $\{|\mathbf{p}\rangle\}$ se demuestra la bien conocida propiedad de la transformada de Fourier:

$$\begin{aligned} \langle \phi | \psi \rangle &= \int d^3r \langle \phi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \\ &= \int d^3p \bar{\phi}^*(\mathbf{p}) \bar{\psi}(\mathbf{p}) \end{aligned} \quad [6.5.22]$$

CAMBIO DE LA REPRESENTACIÓN $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ A LA REPRESENTACIÓN $\{|\mathbf{p}\rangle\}$:

Esto se logra usando el método descrito en [6.3.5], la única diferencia radica en el hecho de que se está tratando con bases continuas. Cambiando de una base a otra se tienen los siguientes números:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle^* = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \quad [6.5.23]$$

Un ket dado $|\psi\rangle$ se representa por $\langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r})$ en la representación $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ y por $\langle \mathbf{p} | \psi \rangle = \bar{\psi}(\mathbf{p})$ en la representación $\{|\mathbf{p}\rangle\}$. Las funciones $\psi(\mathbf{r})$ y $\bar{\psi}(\mathbf{p})$ están relacionadas por la transformación de Fourier.

Esto es en efecto en lo que las fórmulas de las representaciones cambian:

$$\langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \int d^3p \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \psi \rangle$$

Esto es:

$$\psi(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3p e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \bar{\psi}(\mathbf{p}) \quad [6.5.24]$$

Inversamente:

$$\langle \mathbf{p} | \psi \rangle = \int d^3r \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$$

Esto es:

$$\bar{\psi}(\mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3r e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) \quad [6.5.25]$$

Se puede pasar de los elementos de matriz $\langle \mathbf{r}' | A | \mathbf{r} \rangle = A(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ de un operador A en la representación $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ a los elementos de matriz $\langle \mathbf{p}' | A | \mathbf{p} \rangle = A(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ del mismo operador en la representación $\{|\mathbf{p}\rangle\}$:

$$A(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}-\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}')} A(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \quad [6.5.26]$$

Y una fórmula análoga permite calcular $A(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ a partir de $A(\mathbf{p}', \mathbf{p})$.

LOS OPERADORES R Y P

Sea $|\psi\rangle$ un ket arbitrario de E_r y $\langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r}) \equiv \psi(x, y, z)$ la correspondiente función de onda. Usando la definición de operador X , el ket:

$$|\psi'\rangle = X |\psi\rangle \quad [6.5.27]$$

Es representado, en la base $\{|\mathbf{r}\rangle\}$, por la función $\langle \mathbf{r} | \psi' \rangle = \psi'(\mathbf{r}) \equiv \psi'(x, y, z)$ como:

$$\psi'(x, y, z) = x \psi(x, y, z) \quad [6.5.28]$$

En la representación $\{|\mathbf{r}\rangle\}$, el operador X coincide con el operador que multiplica por x . Se pueden introducir también los operadores Y y Z de una manera análoga. Así se tienen las siguientes definiciones:

$$\langle \mathbf{r} | X | \psi \rangle = x \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \quad [6.5.29]$$

$$\langle \mathbf{r} | Y | \psi \rangle = y \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$$

$$\langle \mathbf{r} | Z | \psi \rangle = z \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$$

Donde los números x, y, z son precisamente los índices que marcan el ket $|\mathbf{r}\rangle$. X, Y, Z pueden ser considerados como componentes de un “operador vectorial” $\mathbf{R}$.

La manipulación de los operadores X, Y, Z es particularmente simple en la representación $\{|\mathbf{r}\rangle\}$. Por ejemplo, para calcular los elementos de la matriz $\langle \phi | X | \psi \rangle$, todo lo que se necesita hacer es insertar la relación de cerradura [6.5.7-b] entre $\langle \phi |$ y X y usar la definición [6.5.29]:

$$\begin{aligned} \langle \phi | X | \psi \rangle &= \int d^3\mathbf{r} \langle \phi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | X | \psi \rangle \\ &= \int d^3\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r}) x \psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad [6.5.30]$$

Similarmente, se define el operador $\mathbf{P}$ por sus componentes P_x, P_y, P_z , que actúa en la representación $\{|\mathbf{p}\rangle\}$, como:

$$\langle \mathbf{p} | P_x | \psi \rangle = p_x \langle \mathbf{p} | \psi \rangle \quad [6.5.31]$$

$$\langle \mathbf{p} | P_y | \psi \rangle = p_y \langle \mathbf{p} | \psi \rangle$$

$$\langle \mathbf{p} | P_z | \psi \rangle = p_z \langle \mathbf{p} | \psi \rangle$$

Donde p_x, p_y, p_z , son los índices que aparecen en $|\mathbf{p}\rangle$.

El operador $\mathbf{P}$ también puede actuar en la representación $\{|\mathbf{r}\rangle\}$. Para mostrar la manera en que lo hace, se usa la relación [6.5.7-d] y la transformación matricial [6.5.23] para obtener:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | P_x | \psi \rangle &= \int d^3p \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | P_x | \psi \rangle \\ &= (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3p e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} p_x \bar{\psi}(\mathbf{p}) \end{aligned} \quad [6.5.32]$$

Aparece en esta última ecuación la transformada de Fourier de $p_x \bar{\psi}(\mathbf{p})$, que es: $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(\mathbf{r})$.

Entonces:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{P} | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \nabla \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \quad [6.5.33]$$

En la representación $\{|\mathbf{r}\rangle\}$, el operador $\mathbf{P}$ coincide con el operador diferencial $\frac{\hbar}{i} \nabla$ aplicado a las funciones de onda. El cálculo de un elemento de matriz como $\langle \phi | P_x | \psi \rangle$ en la representación $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ se realiza de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \langle \phi | P_x | \psi \rangle &= \int d^3r \langle \phi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | P_x | \psi \rangle \\ &= \int d^3r \phi^*(\mathbf{r}) \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right] \psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad [6.5.34]$$

Estando en la representación $\{|\mathbf{r}\rangle\}$, también se puede calcular los conmutadores entre los operadores X, Y, Z, P_x, P_y, P_z . Por ejemplo:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | [X, P_x] | \psi \rangle &= \langle \mathbf{r} | (XP_x - P_xX) | \psi \rangle \\ &= x \langle \mathbf{r} | P_x | \psi \rangle - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle \mathbf{r} | X | \psi \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\hbar}{i} \mathbf{x} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \langle \mathbf{r} | \psi \rangle - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{x} \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \\
&= i \hbar \langle \mathbf{r} | \psi \rangle
\end{aligned}
\tag{6.5.35}$$

Este cálculo es válido para todo $|\psi\rangle$ y para cualquier ket en la base $|\mathbf{r}\rangle$.

Así se encuentra que:

$$[X, P_x] = i \hbar \tag{6.5.36}$$

De la misma manera se encuentran los otros conmutadores entre las componentes de $\mathbf{R}$ y $\mathbf{P}$. Los resultados pueden escribirse en la forma:

$$\left. \begin{aligned}
[R_i, R_j] &= 0 \\
[P_i, P_j] &= 0 \\
[R_i, P_j] &= i \hbar \delta_{ij}
\end{aligned} \right\} i, j = 1, 2, 3 \tag{6.5.37}$$

Donde R_1, R_2, R_3 , y P_1, P_2, P_3 designan respectivamente a X, Y, Z y P_x, P_y, P_z . Las fórmulas E-30) se conocen como *relaciones canónicas de conmutación*.

Nota: el conmutador $[X, P_x]$ es un operador, y debe escribirse como $[X, P_x] = i \hbar \mathbb{1}$. Sin embargo, usualmente se reemplaza el operador identidad $\mathbb{1}$ por el número 1, excepto cuando es importante hacer la distinción.

LOS OPERADORES $\mathbf{R}$ Y $\mathbf{P}$ SON HERMITIANOS:

Para mostrar, por ejemplo, que X es un operador hermitiano se usa la fórmula [6.5.30]:

$$\begin{aligned}
\langle \varphi | X | \psi \rangle &= \int d^3r \varphi^*(\mathbf{r}) x \psi(\mathbf{r}) \\
&= \left[\int d^3r \psi^*(\mathbf{r}) x \varphi(\mathbf{r}) \right]^* \\
&= \langle \psi | X | \varphi \rangle^*
\end{aligned}
\tag{6.5.38}$$

Esta es una ecuación característica de operador hermitiano. Pruebas similares muestran que Y y Z también lo son. Para P_x, P_y, P_z puede usarse la representación $\{|\mathbf{p}\rangle\}$, y los cálculos son análogos.

Una prueba alternativa e interesante se puede hacer usando la ecuación [6.5.33], ... ¡pero resulta complicada!

VECTORES PROPIOS DE R Y P:

Considérese la acción del operador X sobre el $|\mathbf{r}_0\rangle$; de acuerdo con [6.5.29], se tiene que:

$$\langle \mathbf{r} | X | \mathbf{r}_0 \rangle = x \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}_0 \rangle = x \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = x_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = x_0 \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}_0 \rangle \quad [6.5.39]$$

Esta ecuación expresa el hecho de que las componentes, en la representación $\{|\mathbf{r}\rangle\}$, del ket $X|\mathbf{r}_0\rangle$ son iguales a las del ket $|\mathbf{r}_0\rangle$ multiplicadas por x_0 . Entonces, se tiene:

$$X |\mathbf{r}_0\rangle = x_0 |\mathbf{r}_0\rangle \quad [6.5.40]$$

Un argumento análogo muestra que los kets $|\mathbf{r}_0\rangle$ son también vectores propios de los operadores Y y Z . Omitiendo el índice cero que resulta innecesario, se puede escribir:

$X \mathbf{r}\rangle = x \mathbf{r}\rangle$
$Y \mathbf{r}\rangle = y \mathbf{r}\rangle$
$Z \mathbf{r}\rangle = z \mathbf{r}\rangle$

[6.5.41]

Los kets $|\mathbf{r}\rangle$ son entonces kets propios comunes a X , Y y Z .

Argumentos similares para el caso del operador $\mathbf{P}$ en la representación $\{|\mathbf{p}\rangle\}$ permiten obtener:

$P_x \mathbf{p}\rangle = P_x \mathbf{p}\rangle$
$P_y \mathbf{p}\rangle = P_y \mathbf{p}\rangle$
$P_z \mathbf{p}\rangle = P_z \mathbf{p}\rangle$

[6.5.42]

R Y P SON OBSERVABLES:

Las relaciones [6.5.7-b] y [6.5.7-d] expresan el hecho de que los vectores $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ y $\{|\mathbf{p}\rangle\}$ constituyen bases en E_r . Entonces $\mathbf{R}$ y $\mathbf{P}$ son observables.

Más aún, la especificación de los tres valores propios x_0, y_0, z_0 de X, Y, Z únicamente determina el correspondiente vector propio $|\mathbf{r}_0\rangle$: en la representación $\{|\mathbf{r}\rangle\}$, sus coordenadas son $\delta(x - x_0)\delta(y - y_0)\delta(z - z_0)$. El conjunto de operadores X, Y, Z constituyen un conjunto completo de conmutadores observables.

De la misma manera, se puede mostrar que las tres componentes P_x, P_y, P_z de $\mathbf{P}$, también constituyen un conjunto completo de conmutadores observables en E_r . Nótese que X no constituye un conjunto completo de conmutadores observables por sí mismo. Cuando el índice x_0 es fijo, y_0 y z_0 pueden tomar cualesquiera valores reales. Entonces, cada valor propio x_0 es infinitamente degenerado.

6.6 Producto tensorial de espacios de estados

El concepto de producto tensorial de espacios de estados (también llamado *producto de Kronecker*) permite resolver el siguiente problema. Sean (S_1) y (S_2) dos sistemas físicos aislados (por ejemplo, dos sistemas que se encuentren tan alejados entre sí que sus interacciones sean completamente nulas). Los espacios de estados correspondientes a cada uno de estos sistemas serán E_1 y E_2 respectivamente. Ahora bien, cuando se considera que estos dos sistemas forman uno solo, digamos (S) [lo cual es indispensable cuando se acercan lo suficiente como para interactuar] interesa conocer el espacio de estados E correspondiente.

Así, por ejemplo, para ciertas partículas se tiene un momento angular intrínseco o espín. Adicionalmente a los grados de libertad externos (posición, momento) que son tratados usando los observables $\mathbf{R}$ y $\mathbf{P}$ definidos en el espacio de estados E_r , puede ser necesario llevar un recuento de los grados de libertad internos e introducir observables de espín que actúan en el espacio E_s . El espacio de estados E de la partícula con espín puede verse como el producto tensorial de E_r y E_s .

DEFINICIÓN Y PROPIEDADES DEL PRODUCTO TENSORIAL

Sean E_1 y E_2 dos espacios, de dimensión N_1 y N_2 respectivamente (N_1 y N_2 pueden ser finitos o infinitos). Los vectores y operadores de estos espacios tendrán asignados los índices (1) ó (2) dependiendo a que espacio pertenecen, ya sea a E_1 ó a E_2 .

Nota: Las siguientes definiciones podrán extenderse fácilmente al producto tensorial de un número finito de espacios de estados.

PRODUCTO TENSORIAL DE ESPACIOS DE ESTADOS:

Por definición el espacio vectorial de estados E se llama producto tensorial de E_1 y E_2 :

$$E \equiv E_1 \otimes E_2 \quad [6.6.1]$$

Si se asocia con dos vectores $|\varphi(1)\rangle \in E_1$ y $|\chi(2)\rangle \in E_2$, entonces E puede denotarse por:

$$|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle \quad [6.6.2]$$

Que es el producto tensorial de $|\varphi(1)\rangle$ y $|\chi(2)\rangle$, esta correspondencia satisface las siguientes condiciones:

- i) Es lineal respecto de la multiplicación por números complejos:

$$[\lambda |\varphi(1)\rangle] \otimes |\chi(2)\rangle = \lambda [|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle] \quad [6.6.3]$$

$$|\varphi(1)\rangle \otimes [\mu |\chi(2)\rangle] = \mu [|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle]$$

ii) Es distributivo con respecto a la adición de vectores:

$$\begin{aligned} |\varphi(1)\rangle \otimes [|\chi_1(2)\rangle + |\chi_2(2)\rangle] &= |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi_1(2)\rangle + |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi_2(2)\rangle \\ [|\varphi_1(1)\rangle + |\varphi_2(1)\rangle] \otimes |\chi(2)\rangle &= |\varphi_1(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle + |\varphi_2(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle \end{aligned} \quad [6.6.4]$$

iii) Cuando una base ha sido elegida en cada uno de los espacios, $\{|u_i(1)\rangle\}$ para E_1 y $\{|v_l(2)\rangle\}$ para E_2 , el conjunto de vectores $\{|u_i(1)\rangle\} \otimes \{|v_l(2)\rangle\}$ constituyen una base para E . Si las dimensiones correspondientes son N_1 y N_2 respectivamente, y son finitas, entonces la dimensión de E es $N_1 N_2$.

VECTORES DE E :

Considérese el producto tensorial de vectores $|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle$. Como sean $|\varphi(1)\rangle$ y $|\chi(2)\rangle$ pueden ser expresados en las bases $\{|u_i(1)\rangle\}$ y $\{|v_l(2)\rangle\}$ correspondientemente:

$$\begin{aligned} |\varphi(1)\rangle &= \sum_i a_i |u_i(1)\rangle \\ |\chi(2)\rangle &= \sum_l b_l |v_l(2)\rangle \end{aligned} \quad [6.6.5]$$

Usando las propiedades descritas en el punto anterior, la expansión de $|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle$ en la base $|u_i(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle$ puede escribirse como:

$$|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle = \sum_{i,l} a_i b_l |u_i(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle \quad [6.6.6]$$

¡Las componentes de un producto tensorial son el producto de las componentes de los vectores!

Existen vectores en E que no son productos tensoriales de un vector perteneciente a E_1 por otro de E_2 . Ya que $|u_i(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle$ constituyen por hipótesis una base de E , el vector más general de E se expresa por:

$$|\psi\rangle = \sum_{i,l} c_{i,l} |u_i(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle \quad [6.6.7]$$

Dados $N_1 N_2$ números complejos arbitrarios $c_{i,l}$, no siempre es posible ponerlos en forma de productos, $a_i b_l$, de N_1 números a_i y N_2 números b_l . Entonces, en general vectores $|\varphi(1)\rangle$ y $|\chi(2)\rangle$ de los que $|\psi\rangle$ sea el producto tensorial no existen. Sin embargo, un vector arbitrario de E siempre puede ser expresado mediante una combinación lineal de productos tensoriales de vectores, como lo establece la fórmula [6.6.7].

EL PRODUCTO ESCALAR EN E :

La existencia de productos escalares en E_1 y E_2 permite definir un producto escalar en E igualmente. Primero se define el producto escalar de $|\varphi(1)\rangle |\chi(2)\rangle = |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle$ por $|\varphi'(1)\rangle |\chi'(2)\rangle = |\varphi'(1)\rangle \otimes |\chi'(2)\rangle$ escribiendo:

$$\langle \varphi'(1) \chi'(2) | \varphi(1) \chi(2) \rangle = \langle \varphi'(1) | \varphi(1) \rangle \langle \chi'(2) | \chi(2) \rangle \quad [6.6.8]$$

Para dos vectores arbitrarios en E , simplemente se usan las propiedades fundamentales del producto escalar, ya que cada uno de estos vectores es una combinación lineal de vectores de producto tensorial.

Nótese, en particular, que la base $\{|u_i(1)\rangle |v_l(2)\rangle = |u_i(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle\}$ es ortonormal si cada una de las bases $\{|u_i(1)\rangle\}$ y $\{|v_l(2)\rangle\}$ son:

$$\langle u_i'(1) v_l'(2) | u_i(1) v_l(2) \rangle = \langle u_i'(1) | u_i(1) \rangle \langle v_l'(2) | v_l(2) \rangle = \delta_{ii'} \delta_{ll'} \quad [6.6.9]$$

PRODUCTO TENSORIAL DE OPERADORES:

Considérese un operador lineal $A(1)$ definido en E_1 . Se asocia con este el operador lineal $\tilde{A}(1)$ actuando en E , llamado extensión de $A(1)$ en E , y que se caracteriza de la siguiente manera: cuando $\tilde{A}(1)$ se aplica al vector producto tensorial $|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle$, se obtiene, por definición:

$$\tilde{A}(1) [|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle] = [\tilde{A}(1)|\varphi(1)\rangle] \otimes |\chi(2)\rangle \quad [6.6.10]$$

La hipótesis de que $\tilde{A}(1)$ es lineal es suficiente para que quede determinado por completo. Un vector arbitrario $|\psi\rangle$ de E puede escribirse en la forma [6.6.7]. La definición [6.6.10] da la acción de $\tilde{A}(1)$ sobre $|\psi\rangle$:

$$\tilde{A}(1) |\psi\rangle = \sum_{i,l} c_{i,l} [A(1) |u_i(1)\rangle] \otimes |v_l(2)\rangle \quad [6.6.11]$$

De manera análoga se obtiene la extensión $\tilde{B}(2)$ del operador $B(2)$ definido en E_2 .

Ahora, sean $A(1)$ y $B(2)$ dos operadores lineales actuando respectivamente en E_1 y E_2 . Su producto tensorial $A(1) \otimes B(2)$ es un operador lineal en E , definido por la relación que describe la acción sobre los vectores del producto tensorial:

$$[A(1) \otimes B(2)] [|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle] = [A(1) |\varphi(1)\rangle] \otimes [B(2) |\chi(2)\rangle] \quad [6.6.12]$$

Esta definición es suficiente para caracterizar $A(1) \otimes B(2)$.

COMENTARIOS:

- i) Los operadores de extensión son casos especiales de productos tensoriales: si $\mathbb{1}(1)$ y $\mathbb{1}(2)$ son operadores identidad en E_1 y E_2 respectivamente, $\tilde{A}(1)$ y $\tilde{B}(2)$ se pueden escribir:

$$\tilde{A}(1) = A(1) \otimes \mathbb{1}(2)$$

$$\tilde{B}(2) = \mathbb{1}(1) \otimes B(2) \quad [6.6.13]$$

Inversamente el producto tensorial $A(1) \otimes B(2)$ coincide con el producto ordinario de dos operadores $\tilde{A}(1)$ y $\tilde{B}(2)$ en E :

$$A(1) \otimes B(2) = \tilde{A}(1) \tilde{B}(2) \quad [6.6.14]$$

- ii) Es fácil mostrar que dos operadores tales como $\tilde{A}(1)$ y $\tilde{B}(2)$ conmutan en E :

$$[\tilde{A}(1), \tilde{B}(2)] = 0 \quad [6.6.15]$$

Se debe verificar que $\tilde{A}(1) \tilde{B}(2)$ y $\tilde{B}(2) \tilde{A}(1)$ dan el mismo resultado cuando actúan sobre un vector arbitrario de la base $\{|u_i(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle\}$:

$$\begin{aligned} \tilde{A}(1) \tilde{B}(2) |u_i(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle &= \tilde{A}(1) |u_i(1)\rangle \otimes [\tilde{B}(2) |v_l(2)\rangle] \\ &= [\tilde{A}(1) |u_i(1)\rangle] \otimes [\tilde{B}(2) |v_l(2)\rangle] \end{aligned} \quad [6.6.16]$$

$$\begin{aligned} \tilde{B}(2) \tilde{A}(1) |u_i(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle &= \tilde{B}(2) [\tilde{A}(1) |u_i(1)\rangle] \otimes |v_l(2)\rangle \\ &= [\tilde{A}(1) |u_i(1)\rangle] \otimes [\tilde{B}(2) |v_l(2)\rangle] \end{aligned} \quad [6.6.17]$$

- iii) En el producto vectorial tensorial, el proyector $|\varphi(1)\chi(2)\rangle = |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle$, que es un operador que actúa en E , se obtiene tomando el producto tensorial de los proyectores sobre $|\varphi(1)\rangle$ y $|\chi(2)\rangle$:

$$|\varphi(1)\chi(2)\rangle \langle \varphi(1)\chi(2)| = |\varphi(1)\rangle \langle \varphi(1)| \otimes |\chi(2)\rangle \langle \chi(2)| \quad [6.6.18]$$

Esta relación se sigue inmediatamente de la definición de producto escalar en E .

- iv) Así como los vectores, existen operadores en E que no corresponden a productos tensoriales de un operador en E_1 y por otro de E_2 .

NOTACIÓN:

En los productos tensoriales, en ocasiones se omite el símbolo $\otimes$. Además, usualmente se denotan $A(1)$ y $\tilde{A}(1)$ de la misma forma por $A(1)$.

ESTADOS DE PARTÍCULAS EN UNA Y TRES DIMENSIONES

Considérese el problema de la relación entre los espacios de estados E_x y E_r (también denotado E_r).

El espacio de estados E_x corresponde a una partícula unidimensional; esto es, el espacio de estados asociado a la función de onda $\varphi(x)$. En E_x , el observable X constituye, por si mismo, un conjunto completo de observables que conmutan (C.C.O.C.); sus vectores propios son los ket de la base en la representación $\{|x\rangle\}$. Un vector $|\varphi\rangle$ de E_x se caracteriza en esta representación por la función de onda $\varphi(x) = \langle x|\varphi\rangle$; en particular, el ket base $|x_0\rangle$ corresponde a $\xi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$.

De la misma manera, es posible introducir los espacios E_y y E_z asociados con las funciones de onda $\chi(y)$ y $\omega(z)$. El observable Y forma un C.C.O.C. en E_y , como Z en E_z . Los correspondientes vectores propios son los kets de las bases en las representaciones $\{|y\rangle\}$ y $\{|z\rangle\}$ de E_y y E_z respectivamente. Un vector $|\chi\rangle$ de E_y (o $|\omega\rangle$ de E_z) se caracteriza en la representación $\{|y\rangle\}$ (o $\{|z\rangle\}$) por una función $\chi(y) = \langle y|\chi\rangle$ (o $\omega(z) = \langle z|\omega\rangle$). La función que corresponde al ket de la base $|y_0\rangle$ (o $|z_0\rangle$) es $\delta(y - y_0)$ (o $\delta(z - z_0)$).

Entonces, sea el producto tensorial:

$$E_{xyz} = E_x \otimes E_y \otimes E_z \quad [6.6.19]$$

Así se obtiene una base en E_{xyz} del producto tensorial de las bases $\{|x\rangle\}$, $\{|y\rangle\}$ y $\{|z\rangle\}$. Esta base se puede denotar por $\{|x, y, z\rangle\}$, con:

$$|x, y, z\rangle = |x\rangle |y\rangle |z\rangle \quad [6.6.20]$$

Los kets de la base son simultáneamente vectores propios de los operadores extendidos X , Y y Z en E_{xyz} :

$$\begin{aligned} X |x, y, z\rangle &= x |x\rangle |y\rangle |z\rangle \\ Y |x, y, z\rangle &= y |x\rangle |y\rangle |z\rangle \\ Z |x, y, z\rangle &= z |x\rangle |y\rangle |z\rangle \end{aligned} \quad [6.6.21]$$

Entonces, E_{xyz} coincide con E_r , el espacio de estados de una partícula tridimensional y $|x, y, z\rangle$ con $|\mathbf{r}\rangle$:

$$|x, y, z\rangle \equiv |\mathbf{r}\rangle = |x\rangle |y\rangle |z\rangle \quad [6.6.22]$$

Donde x, y, z son precisamente las coordenadas cartesianas de $\mathbf{r}$.

Existen en E_r los kets $|\varphi \chi \omega\rangle = |\varphi\rangle |\chi\rangle |\omega\rangle$ que son productos tensoriales de los tres kets, uno de E_x , uno de E_y y uno de E_z . Sus componentes en la representación $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ son entonces.

$$\langle \mathbf{r} | \varphi \chi \omega \rangle = \langle x | \varphi \rangle \langle y | \chi \rangle \langle z | \omega \rangle \quad [6.6.23]$$

Las funciones de onda quedan factorizadas: $\varphi(x)\chi(y)\omega(z)$. Este es el caso de los vectores base:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}_0 \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0) \quad [6.6.24]$$

Nótese que el espacio de estados más general E_r no es un producto. Así se escribe:

$$|\psi\rangle = \int dx dy dz \psi(x, y, z) |x, y, z\rangle \quad [6.6.25]$$

En $\psi(x, y, z) = \langle x, y, z | \psi \rangle$, las dependencias en x, y, z no pueden, en general, ser factorizadas: cada una de las funciones de onda asociadas con los kets de E_r es una función de onda de tres variables.

Los resultados anteriores permiten entender el por qué X constituye un C.C.O.C. por sí mismo en E_x , aunque no tiene esa propiedad en E_r : los valores propios de su extensión en E_r son los mismos que en E_x , pero vienen a ser infinitamente degenerados debido a que E_y y E_z son dimensionalmente infinitos.

UNA APLICACIÓN IMPORTANTE:

A continuación, se resuelve en E_r la ecuación de valores propios de un operador H como:

$$H = H_x + H_y + H_z \quad [6.6.26]$$

Donde H_x, H_y y H_z son la extensión de los observables que actúan en E_x, E_y y E_z . En la práctica, se reconoce H_x como la extensión de un observable en E_x ya que está construido usando únicamente los operadores X y P_x . Entonces se puede escribir:

$$\begin{aligned} H_x |\varphi_n\rangle &= E_x^n |\varphi_n\rangle \\ H_y |\chi_p\rangle &= E_y^p |\chi_p\rangle \\ H_z |\omega_r\rangle &= E_z^r |\omega_r\rangle \end{aligned} \quad [6.6.27]$$

Los valores propios de H son todos de la forma:

$$E^{n, p, r} = E_x^n + E_y^p + E_z^r \quad [6.6.28]$$

Y el vector propio correspondiente a $E^{n, p, r}$ es el producto tensorial $|\varphi_n\rangle |\chi_p\rangle |\omega_r\rangle$; la función de onda asociada con este vector es el producto:

$$\varphi_n(x) \chi_p(y) \omega_r(z) = \langle x | \varphi_n \rangle \langle y | \chi_p \rangle \langle z | \omega_r \rangle.$$

CONJUNTOS DE OPERADORES QUE CONMUTAN EN E

Considérese el sistema físico constituido de dos partículas (sin espín). Para distinguirlas se numeran como (1) y (2). La descripción mecánica del sistema cuántico se puede hacer generalizando el concepto de función de onda. Así un estado del sistema puede caracterizarse, en un tiempo dado, por una función de seis variables espaciales $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi(x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2)$. La interpretación probabilística de esta función de onda de dos partículas es la siguiente: la probabilidad $dP(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, en un tiempo dado, de encontrar la partícula (1) en el volumen $d^3r_1 = dx_1 dy_1 dz_1$ situado en el punto $\mathbf{r}_1$, y la partícula (2) en el volumen $d^3r_2 = dx_2 dy_2 dz_2$ en el punto $\mathbf{r}_2$, es:

$$dP(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 d^3r_1 d^3r_2 \quad [6.6.29]$$

La constante de normalización C se obtiene imponiendo la condición de que la probabilidad total sea igual a 1:

$$\frac{1}{C} = \int d^3r_1 d^3r_2 |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 \quad [6.6.30]$$

Los observables X_1, Y_1, Z_1 pueden ser definidos en E_{r1} . Similarmente en el espacio de estados E_{r2} de la partícula (2) se introduce la representación $\{|\mathbf{r}_2\rangle\}$ y los observables X_2, Y_2, Z_2 . Tomando el producto tensorial:

$$E_{r1r2} = E_{r1} \otimes E_{r2} \quad [6.6.31]$$

El conjunto de vectores:

$$|\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\rangle = |\mathbf{r}_1\rangle |\mathbf{r}_2\rangle \quad [6.6.32]$$

Forman una base en E_{r1r2} , consecuentemente, cada ket $|\psi\rangle$ de este espacio se puede escribir como:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \psi \rangle \quad [6.6.33]$$

Más aún, el cuadrado de la norma de $|\psi\rangle$ es igual a:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int d^3r_1 d^3r_2 |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 \quad [6.6.34]$$

Para que sea finito, $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ debe ser cuadrado-integrable. Entonces una función de onda $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ está asociada con cada ket de E_{r1r2} : *El espacio de estados de un sistema de dos partículas es el producto tensorial de los espacios que corresponden a cada una.*

Se asume que el estado del sistema puede describirse por el ket producto tensorial:

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle \quad [6.6.35]$$

La correspondiente función de onda puede factorizarse como:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \psi \rangle = \langle \mathbf{r}_1 | \psi_1 \rangle \langle \mathbf{r}_2 | \psi_2 \rangle = \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) \quad [6.6.36]$$

En este caso, se dice que *no hay correlación entre las partículas*. Según lo anterior se puede llegar a la siguiente generalización: *cuando un sistema está compuesto de la unión de dos o más sistemas simples, su espacio de estados es el producto tensorial de los espacios que corresponden a cada uno de los componentes del sistema.*

7. Postulados de la mecánica cuántica

7.1 Variables dinámicas fundamentales

En la mecánica clásica el movimiento de un sistema físico se determina por la posición $\mathbf{r}(x, y, z)$ y la velocidad $\mathbf{v}(\dot{x}, \dot{y}, \dot{z})$ de cada uno de sus puntos como función del tiempo. En general, para describir un sistema, se pueden usar coordenadas generalizadas $q_i(t)$ ($i = 1, 2, \dots, N$), cuya derivada respecto al tiempo $\dot{q}_i(t)$, son las velocidades generalizadas. Especificando $q_i(t)$ y $\dot{q}_i(t)$ se puede calcular, en cualquier instante dado, la posición y la velocidad de cualquier punto del sistema. Usando la función lagrangiana $L(q_i, \dot{q}_i, t)$ se define el momento conjugado p_i de cada una de las coordenadas generalizadas q_i :

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad [7.1.1]$$

Las $q_i(t)$ y $p_i(t)$ ($i = 1, 2, 3, \dots, N$) se llaman variables dinámicas fundamentales. Todas las cantidades físicas asociadas a un sistema (energía, momento angular, etc.) pueden expresarse en términos de variables dinámicas fundamentales. Por ejemplo, la energía total de un sistema está dada por el hamiltoniano clásico $H(q_i, p_i, t)$. El movimiento de un sistema puede estudiarse usando también las ecuaciones de Lagrange o las ecuaciones canónicas de Hamilton-Jacobi, que se escriben:

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad [7.1.2]$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad [7.1.3]$$

En el caso especial de que el sistema consista en un solo punto de masa m , las q_i son simplemente las tres coordenadas del punto, y las $\dot{q}_i$ serán las componentes de su velocidad $\mathbf{v}$. Si las fuerzas que actúan sobre esta partícula pueden ser derivadas de un potencial escalar $V(\mathbf{r}, t)$, los tres momentos conjugados en esa posición $\mathbf{r}$ (es decir, las componentes de su cantidad de movimiento lineal $\mathbf{p}$) son iguales a las componentes de su cantidad de movimiento mecánico $m\mathbf{v}$. La **energía total** se escribe entonces:

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t) \quad [7.1.4]$$

Y su momento angular con respecto al origen de coordenadas:

$$\mathbf{L} \equiv \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad [7.1.5]$$

Ya que $H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \mathbf{p}^2/2m + V(\mathbf{r}, t)$, las ecuaciones de Hamilton-Jacobi (A-2) aquí toman la forma bien conocida:

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m} \quad [7.1.6]$$

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\nabla V \quad [7.1.7]$$

EJEMPLOS PRÁCTICOS:

Problema: se resuelve el oscilador armónico isotópico en tres dimensiones por el método de potencias:

El oscilador armónico tridimensional consiste en una partícula localizada en un potencial central proporcional al cuadrado de la distancia al centro.

Su hamiltoniano está dado por:

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \mathbf{r}^2 ;$$

Donde $\hat{H}$ es la suma de tres términos: $\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z$.

Y donde: $\hat{H}_i = \frac{1}{2m} (p_i^2 + m\omega^2 r_i^2), \quad \text{con } i = x, y \text{ ó } z.$

Los valores propios de $\hat{H}$ están dados por la fórmula: $(n + 3/2)\hbar\omega$, con $n = 0, 1, 2, \dots, \infty$.

Y están $\frac{1}{2}(n + 1)(n + 2)$ degenerados. Los observables N_x, N_y, N_z forman un conjunto completo de constantes de movimiento y los vectores propios $|n_x n_y n_z\rangle$ de su base están etiquetados por los sus tres valores propios correspondientes n_x, n_y y n_z .

Estos vectores se deducen de la fórmula: $|n_x n_y n_z\rangle = (n_x! n_y! n_z!)^{-1/2} a_x^{\dagger n_x} a_y^{\dagger n_y} a_z^{\dagger n_z} |000\rangle$.

Y a partir del vector del estado base $|000\rangle$ definido por: $a_x|0\rangle + a_y|0\rangle + a_z|0\rangle = 0$.

Introduciendo el momento angular: $\mathbf{L} \equiv \mathbf{r} \times \mathbf{p}$.

Y de acuerdo con la propiedad conocida del hamiltoniano para un potencial central, $\hat{H}, \hat{L}^2$ y L_z constituyen un conjunto completo de observables que conmutan entre sí.

Los vectores propios $|n/m\rangle$ comunes a estos tres observables se identifican por los tres números cuánticos n, l, m , y por los correspondientes valores propios de $\hat{H}, \hat{L}^2$ y L_z que son: $(n + 3/2)\hbar\omega, l(l+1)\hbar^2$ y $m\hbar$.

Los vectores $|n/m\rangle$ forman un conjunto ortonormal completo de vectores propios de $\hat{H}$. Estos se derivan de los vectores $|n_x n_y n_z\rangle$ mediante una transformación unitaria.

En $\{\mathbf{r}\}$, el vector $|n_x n_y n_z\rangle$ se representa por la función de onda $\psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y) \psi_{n_z}(z)$.

$|n/m\rangle$ se representa por la función de onda $\Psi_{n/m}(\mathbf{r}) \equiv y_{n/l}(\mathbf{r}) Y_l^m(\theta, \phi) / r$.

donde $y_{n/l}(\mathbf{r})$ es la solución que se hace cero en el origen y es regular en infinito de la ecuación diferencial:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + \frac{m\omega^2 r^2}{2} \right] y_{n/l} = (n + 1/2)\hbar\omega y_{n/l}.$$

Entonces, para determinar los valores que los números cuánticos toman al fijar una n ; es decir, los diferentes estados posibles del momento angular correspondiente a cada nivel de energía, se procede como sigue.

Introduciendo los operadores: $A_1 = 1/2 \sqrt{2} [a_x - ia_y]$

$$A_0 = a_z$$

$$A_{-1} = 1/2 \sqrt{2} [a_x + ia_y]$$

Y los operadores conjugados hermitianos $A_m^\dagger$. Los operadores A_m y $A_m^\dagger$ satisfacen las relaciones de conmutación y se pueden interpretar como operadores de aniquilación y creación del cuanto del tipo m . El número cuántico del tipo m se representa por el operador $N_m A_m^\dagger A_m$. Claramente N_1, N_0 , y N_{-1} forman un conjunto completo de observables y:

$$\hat{H} = (N_1 + N_0 + N_{-1} + 3/2)\hbar\omega, \quad N = N_1 + N_0 + N_{-1}$$

Para cada triplete de valores propios (n_1, n_0, n_{-1}) hay un vector propio común a esos tres observables:

$$|n_1 n_0 n_{-1}\rangle = (n_1! n_0! n_{-1}!)^{-1/2} A_1^{\dagger n_1} A_2^{\dagger n_2} A_{-1}^{\dagger n_{-1}} |000\rangle$$

el ensamble de estos vectores forma un conjunto completo de vectores propios de $\hat{H}$. Así que:

$$\hat{H}|n_1 n_0 n_{-1}\rangle = (n + 3/2)\hbar\omega |n_1 n_0 n_{-1}\rangle$$

$$n = n_1 + n_0 + n_{-1}$$

Estos vectores propios en general no son vectores propios de $\hat{L}^2$, pero si lo son de L_z , ya que: $L_z = (N_+ - N_-)\hbar$ y consecuentemente: $m = n_+ - n_-$.

Sea el subespacio de vectores propios de $\hat{H}$ correspondientes al valor propio $(n + 3/2)\hbar\omega$.

Los $\frac{1}{2}(n + 1)(n + 2)$ vectores $|n_+ n_0 n_-\rangle$ forman una base completa ortonormal de vectores propios de L_z . El número cuántico m puede tomar todos los valores enteros entre $-n$ y n . Es fácil determinar el número c_m para los vectores linealmente independientes correspondiente a cada uno de los valores de m ; el resultado está dado por la siguiente tabla:

$ m = n$	$n - 1$	$n - 2$	$\dots$	$-2s$	$n - (2s + 1)$	$n - (2s + 2)$	$\dots$
$c_m = 1$	1	2	$\dots$	$s + 1$	$s + 1$	$s + 2$	$\dots$

Ahora, de acuerdo con las propiedades del momento angular, para cada valor propio de $\hat{L}^2$, y por ejemplo, para cada valor de l , corresponde cierto número de los conjuntos $(2l + 1)$ vectores del momento angular definido por lm , m en cada caso toma los valores enteros $(2l + 1)$ contenidos entre $-l$ y l . Sea d_l ese número.

Debe ser obvio que: $c_m = \sum_{l \geq m} d_l \Rightarrow d_l = c_l - c_{l+1}$.

Se ve que $d_l = 1$ para $l = n, n - 2, \dots, n - 2s, \dots$ para todos los valores enteros de l con paridad $(-)^n$ contenidos entre 0 y n (incluidos los límites), y $d_l = 0$ para todos los otros valores de l .

En conclusión, para cada valor propio $(n + 3/2)\hbar\omega$ de la energía corresponden $\frac{1}{2}(n + 1)(n + 2)$ estados bien definidos del momento angular (lm). Para cada valor posible l existen $(2l + 1)$ estados propios correspondientes, respectivamente, para los $(2l + 1)$ de m , en el rango $-l$ a l .

Los valores que puede tomar l son:

$n, n - 2, \dots, 0$ si $(-)^n = 1$	$[1/2(n + 2) \text{ valores distintos}]$
$n, n - 2, \dots, 1$ si $(-)^n = -1$	$[1/2(n + 1) \text{ valores distintos}]$

7.2 Degeneración de los niveles de energía

Como sabemos $\hat{H}_x$ constituye un conjunto completo de operadores que conmutan en E_x ; y de la misma manera ocurre con $\hat{H}_y$ en E_y y $\hat{H}_z$ en E_z ; de modo que $\{\hat{H}_x, \hat{H}_y, \hat{H}_z\}$ es un conjunto completo de operadores que conmutan en E_r . entonces existe, salvo un factor constante un único ket $|\psi_{n_x, n_y, n_z}\rangle$ de E_r correspondiente a cada conjunto de valores propios de $\hat{H}_x, \hat{H}_y$ y $\hat{H}_z$, esto es, para enteros fijos no negativos n_x, n_y, n_z .

Sin embargo, $\hat{H}$ por si solo no constituye un conjunto completo de operadores que conmutan, ya que los niveles de energía E_n están degenerados. Si se elige un valor propio de $\hat{H}$, $E_n = (n + 3/2)\hbar \omega$ todos los kets de la base $\{|\psi_{n_x, n_y, n_z}\rangle\}$ que satisfagan $n_x + n_y + n_z = n$ son vectores propios de $\hat{H}$ con valor propio E_n .

El grado de degeneración g_n de E_n es igual al número de los diferentes conjuntos $\{n_x, n_y, n_z\}$ que satisfacen la condición $n_x + n_y + n_z = n$, y esto es independiente del sistema de coordenadas en uso. Para encontrar g_n , se puede proceder de la siguiente manera: con n fija, se elige primero n_x dando uno de los valores $n_x = 0, 1, \dots, n$.

Con n_x ahora fija, se tiene que: $n_y + n_z = n - n_x$. Existen entonces $(n - n_x + 1)$ posibilidades para el par $\{n_y, n_z\}$:

$$\{n_y, n_z\} = \{0, n - n_x\}, \{1, n - n_x - 1\}, \dots, \{n - n_x, 0\}.$$

El grado de degeneración g_n de E_n es entonces: $g_n = \sum_{n_x=0}^n (n - n_x + 1) = (n+1)(n+2)/2$.

Consecuentemente, sólo el estado base $E_0 = (3/2)\hbar \omega$ es no degenerado.

Problema: se encuentran las relaciones de recurrencia para los polinomios asociados de Laguerre:

Entonces teniendo los polinomios de Laguerre asociados definidos por:

$$L_n^k(x) = (-1)^k \frac{d^k}{dx^k} [L_{n+k}(x)].$$

De acuerdo con la forma de la serie $L_n(x)$:

$$L_0^k(x) = 1; L_0^k(x) = -x + k + 1; L_2^k(x) = x^2/2 - (k+2)x + (k+2)(k+1)/2.$$

En general:
$$L_n^k(x) = \sum_{m=0}^n (-1)^m (n+k)! x^m / (n-m)!(k+m)!m!, \quad (k > -1).$$

Se puede desarrollar una función generadora mediante la diferenciación de la función generadora k veces. Ajustando el índice a L_{n+k} , se obtiene:

$$e^{-xz} / (1-z)^{k+1} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n^k(x) z^n, \quad |z| < 1.$$

A partir de esto,
$$L_n^k(0) = (n+k)! / n!k!$$

Las relaciones de recurrencia se pueden establecer con facilidad a partir de la función generadora o por medio de la diferenciación de las relaciones de recurrencia polinomial de Laguerre. Dentro de la gran diversidad de posibilidades se tiene:

$$(n+1)L_{n+1}^k(x) = (2n+k+1-x)L_n^k(x) - (n+k)L_{n-1}^k(x).$$

$$x L_n^{k'}(x) = n L_n^k(x) - (n+k)L_{n-1}^k(x).$$

